

Universidad de Las Palmas de Gran Canaria
Departamento de Matemáticas



Tesis Doctoral

**Construcción de un Modelo Tridimensional
para Ajuste de Campos de Viento y
Dispersión de Contaminantes en la
Atmósfera**

Nancy Sanín Cortés

Las Palmas de Gran Canaria, Diciembre de 2002

Universidad de Las Palmas de Gran Canaria
Departamento de Matemáticas



Tesis Doctoral

**Construcción de un Modelo Tridimensional
para Ajuste de Campos de Viento y
Dispersión de Contaminantes en la
Atmósfera**

Autor: Nancy Sanín Cortés

Director: Gustavo Montero García

Las Palmas de Gran Canaria, Diciembre de 2002

*A mi papá
y a mi mamá*

Índice general

1. Introducción	1
1.1. La Contaminación Atmosférica	1
1.2. Modelos Meteorológicos	5
1.2.1. Modelos Diagnósticos	6
1.2.1.1. Modelo IBMAQ-2	6
1.2.1.2. Modelo NEWEST	7
1.2.1.3. Modelo NOABL	7
1.2.1.4. Modelo MATHEW	7
1.2.1.5. Modelo Moussiopoulos-Flassak	8
1.2.1.6. Modelo de Análisis Objetivo Basado en el Mé- todo de Interpolación de Cressman	8
1.2.2. Modelos Pronósticos	8
1.3. Modelos de Difusión de Contaminantes	9
1.3.1. La Aproximación Euleriana	11
1.3.1.1. Métodos de diferencias finitas	12
1.3.1.2. Métodos de elementos finitos	13
1.3.2. La Aproximación Lagrangiana	13
1.4. Objetivos de la Tesis	15
1.5. Estructura de la Memoria	16

2. Modelización de Campos de Viento	17
2.1. Ecuaciones Constitutivas	17
2.1.1. Módulos de Precisión de Gauss	20
2.2. Coordenadas Conformes al Terreno	21
2.3. Condiciones de Contorno	25
2.4. Construcción del Campo Inicial	26
2.4.1. Análisis de Las Medidas de Las Estaciones	27
2.4.2. Definición de las Variables del Modelo	28
2.4.2.1. Estabilidad Atmosférica	28
2.4.2.2. Clase de Estabilidad de Pasquill	29
2.4.2.3. Función Universal del Perfil del Viento en La Capa Superficial Φ_m	30
2.4.2.4. Parámetro de Coriolis	31
2.4.2.5. Capa Límite Planetaria z_{pbl}	31
2.4.2.6. Capa de Mezcla	31
2.4.2.7. Capa Superficial z_{sl}	32
2.4.2.8. Longitud de Rugosidad	32
2.4.2.9. Velocidad de Fricción	32
2.4.2.10. Viento Geostrófico	34
2.4.3. Interpolación Horizontal	36
2.4.4. Extrapolación Vertical	37
2.5. Esquemas en Diferencias Finitas	38
2.5.1. Nodos Internos	40
2.5.1.1. Derivadas Primeras	40
2.5.1.2. Derivadas Segundas	42
2.5.1.3. Derivadas Cruzadas	43

2.5.2.	Nodos del Contorno	52
2.5.2.1.	Nodos Situados en la Frontera Superior	52
2.5.2.2.	Nodos del Terreno	52
2.5.2.3.	Resto de Nodos del Contorno	53
2.5.3.	Esquemas de las Derivadas de la Función que Define la Topografía del Terreno	57
2.6.	Construcción del Sistema de Ecuaciones	
	Lineales	58
2.6.1.	Ecuaciones Correspondientes a los Nodos de Número de Referencia 0	59
2.6.2.	Ecuaciones Correspondientes a Nodos del Contorno	61
2.6.2.1.	Nodos de Número de Referencia 1	61
2.6.2.2.	Nodos de Número de Referencia 2	62
2.6.2.3.	Nodos de Número de Referencia 3	62
2.6.2.4.	Nodo de Número de Referencia 4	62
2.6.2.5.	Nodo de Número de Referencia 5	63
2.6.2.6.	Nodo de Número de Referencia 6	64
2.6.2.7.	Nodo de Número de Referencia 7	65
2.6.2.8.	Nodos de Número de Referencia 8	66
2.6.2.9.	Nodos de Número de Referencia 9	67
2.6.2.10.	Nodos Número de Referencia 10	67
2.6.2.11.	Nodos Número de Referencia 11	68
2.7.	Resolución del Sistema de Ecuaciones	69
2.7.1.	Algoritmo Bi-CGSTAB	69
3.	Modelización del Transporte de Contaminantes en la Atmósfera	73
3.1.	Modelo de Contaminación Atmosférica	73

3.1.1.	Condiciones de Contorno	74
3.1.1.1.	Deposición Seca	76
3.2.	Estudio del Término Fuente	77
3.2.1.	Emisiones Directas	78
3.2.1.1.	Fuente Puntual	78
3.2.1.2.	Modelo de Pluma Gaussiana	80
3.2.1.3.	Cálculo de σ_y y σ_z	81
3.2.1.4.	Modelos de Emisión Gaussiano	84
3.2.2.	Reacciones Químicas	87
3.2.2.1.	Reacciones Homogéneas en la Atmósfera	87
3.2.3.	Precipitaciones	96
3.2.3.1.	Deposición Húmeda	96
3.3.	Esquema de Alto Orden en el Tiempo	98
3.4.	Construcción del Sistema de Ecuaciones	
	Lineales	99
3.4.1.	Ecuaciones correspondientes a los nodos internos	99
3.4.1.1.	Ecuación Correspondiente al Primer Contami- nante ($i = 1$)	104
3.4.1.2.	Ecuación Correspondiente al Segundo Contami- nante ($i = 2$)	118
3.4.2.	Ecuaciones Correspondientes a los Nodos del Contorno	132
3.4.2.1.	Nodos de Número de Referencia 1	134
3.4.2.2.	Nodos de Número de Referencia 2	134
3.4.2.3.	Nodos de Número de Referencia 3	134
3.4.2.4.	Nodo de Número de Referencia 4	135
3.4.2.5.	Nodo con Número de Referencia 5	135

3.4.2.6. Nodo con Número de Referencia 6	136
3.4.2.7. Nodo con Número de Referencia 7	136
3.4.2.8. Nodos con Número de Referencia 8	137
3.4.2.9. Nodos con Número de Referencia 9	137
3.4.2.10. Nodos con Número de Referencia 10	138
3.4.2.11. Nodos con Número de Referencia 11	138
3.5. Resolución del Sistema de Ecuaciones	138
4. Experimentos Numéricos	139
4.1. Aspectos Generales	139
4.2. Cálculo de Campos de Viento	141
4.2.1. Caso I	144
4.2.2. Caso II	146
4.2.3. Caso III	146
4.2.4. Discusión	148
4.3. Cálculo de dispersión de contaminantes	151
4.3.1. Caso I	152
4.3.2. Caso II	152
4.3.3. Caso III	153
. Conclusiones	155
. Bibliografía	157

Índice de figuras

1.1. Relación entre el modelo Euleriano y el modelo Langrangiano . . .	10
2.1. Módulos de precisión de Gauss para $\alpha \gg 1$	20
2.2. Módulos de precisión de Gauss para $\alpha \ll 1$	21
2.3. Ángulo de desviación del viento sobre la superficie respecto al viento geostrófico.	27
2.4. Valores aproximados de z_0 para distintos tipos de terreno	33
2.5. Perfil vertical del viento	37
2.6. Números de referencia en el cubo unitario	39
2.7. Molécula para los nodos interiores	40
2.8. Mallas con espaciados verticales variables	51
2.9. Número de referencia 1	61
2.10. Número de referencia 2	62
2.11. Número de referencia 4	63
2.12. Número de referencia 5	63
2.13. Número de referencia 6	64
2.14. Número de referencia 7	65
2.15. Número de referencia 8	66
2.16. Número de referencia 9	67
2.17. Número de referencia 10	68

2.18. Número de referencia 11	68
3.1. Difusión de contaminantes desde una fuente puntual.	81
3.2. Conjunto de reacciones que compiten por los radicales libres $OH\cdot$ y $HO_2\cdot$	95
3.3. Molécula para los nodos internos	100
4.1. Islas Canarias	140
4.2. Isolíneas dela Topografía, (en m).	141
4.3. Localización de las estaciones de medida	142
4.4. Malla de cubo unitario (51 x 51 x 14 nodos)	142
4.5. Rosas de los vientos de las estaciones de medida	143
4.6. Caso I, isolíneas de la velocidad del viento (en m/s)	145
4.7. Caso II, Isolíneas de la velocidad del viento (en m/s)	147
4.8. Caso III, Isolíneas de la velocidad del viento (en m/s)	149

Índice de tablas

2.1. Clase de estabilidad de Pasquill	30
2.2. Esquemas de las derivadas primeras de ϕ ; NR: 1,2,4,5 y 6	55
2.3. Esquemas de las derivadas primeras de ϕ ; NR: 7 al 11	56
2.4. Esquemas para las derivadas de la función que define la topografía del terreno	57
3.1. Valores para la deposición seca	77
3.2. Constantes cinéticas del conjunto de las doce reacciones consideradas entre la atmósfera y las familias de contaminantes de azufre y del nitrógeno	91
3.3. Valores para la deposición húmeda	98
4.1. Datos experimentales tomados en las estaciones de medida	146

Capítulo 1

Introducción

En este primer capítulo se hace una presentación del fenómeno objeto de estudio, de su origen y evolución. Se hace mención también de los medios utilizados para una mejor comprensión y análisis de su naturaleza.

1.1. La Contaminación Atmosférica

La contaminación atmosférica se define como: “la introducción en la atmósfera, por el hombre, directa o indirectamente, de sustancias o de energía que tengan una acción nociva de tal naturaleza que pongan en peligro la salud del hombre, que cause daños a los recursos biológicos y a los ecosistemas, que deteriore los bienes materiales y que dañe o perjudique las actividades recreativas y otras utilizaciones legítimas del Medio Ambiente. ”

Durante mucho tiempo se ha considerado que el planeta tenía en su atmósfera suficientes elementos para diluir los contaminantes a ella vertidos. Pero el incremento de las emisiones han concienciado a instituciones públicas y privadas en la necesidad de control del grado de contaminación del aire.

Por tanto, si la emisión de sustancias a la atmósfera, tanto sea de manera directa o indirecta, produce consecuencias adversas sobre la salud, se considera que se está produciendo un problema de contaminación atmosférica. Hay que tener en cuenta que el desarrollo humano está perjudicando al entorno y no es un desarrollo sostenible con el medio ambiente, por lo que la propia confortabilidad del hombre está afectando al mismo. Para evaluar si la existencia de alguna actividad está generando este problema y la magnitud del mismo es necesario la realización de evaluaciones de impacto ambiental. En la definición de contaminación atmosférica se incluye también el daño a bienes materiales por lo que hay que realizar estudios en los que se diagnostique cuál es el estado del Patrimonio Arquitectónico Monumental y establecer las medidas correctoras o de restauración, en caso de ser necesarias, así como el mantenimiento del mismo.

Además, hay que tener en cuenta que la contaminación atmosférica causa además de impactos puntuales que, gracias a la tecnología actual tienen solución, impactos a gran distancia que no son resolubles, tales como:

- El Efecto Invernadero (Cambio Climático)
- Deterioro de la capa de ozono estratosférica
- Lluvia ácida

Según la Agencia Europea de Medio Ambiente los problemas más significativos en el campo de la contaminación atmosférica son:

- Cambio Climático
 - Emisiones de dióxido de carbono, CO_2

- Emisiones de metano, CH_4
- Emisiones de óxido nitroso, N_2O
- Acidificación
 - Emisiones de dióxido de azufre, SO_2
 - Emisiones de óxidos de nitrógeno, NO_x
 - Emisiones de amoníaco, NH_3
 - Cargas climáticas para compuestos de azufre y nitrógeno
- Calidad del aire urbano
 - Superaciones de valores límite
 - Guía para dióxido de azufre SO_2 , dióxido de nitrógeno NO_2 , monóxido de carbono CO , partículas, plomo, Pb y Benceno
 - Exposiciones de la población a SO_2 y NO_2
- Ozono Troposférico
 - Emisiones de componentes orgánicos volátiles sin metano, NMVOCs (*Non Methene Volable Organic Compounds*) y NO_x
 - Exposición de la población al ozono
- Reducción de la capa de ozono estratosférico
 - Emisiones de compuestos de cloro, Cl y bromo, Br que dañan la capa de ozono
 - Clasificación y cuantificación de la influencia sobre la salud humana y medio ambiente
 - Niveles de radiaciones de $UV - B$ a nivel del suelo
 - Medida del deterioro de la capa de ozono

Estos problemas se han originado como consecuencia del:

- Aumento de población

- Fuerte crecimiento del transporte (carretera, aéreo, etc.)
- Continuo crecimiento del turismo
- Continuo incremento del consumo de energía

Actualmente existen modelos bidimensionales de cierta complejidad, sin embargo en el problema de contaminación atmosférica intervienen muchos factores correlacionados que imponen su propia naturaleza. Por ejemplo, las características meteorológicas del ambiente, las condiciones topográficas, los cambios físicos y químicos que pueden experimentar los contaminantes durante el período en que el viento los arrastra. Dichos modelos bidimensionales no ofrecen el suficiente grado de precisión para las variaciones verticales del viento.

Por ello es necesario elaborar un modelo tridimensional mediante un desarrollo numérico que considere todos éstos factores en la propia orografía del terreno y sus condiciones atmosféricas, tanto en el campo de velocidades de viento como en la dispersión de contaminantes. Éste se realizará utilizando una discretización en diferencias finitas, pues éstas nos permiten esquemas de alto orden y un mejor estudio en las cercanías del terreno y en las variaciones verticales del viento.

Dentro de las utilidades de nuestro trabajo está la obtención de medidas de campos de viento en zonas de las islas Canarias a partir de una toma de datos en estaciones de meteorológicas. Esto permite localizar las zonas de mayor potencial eólico y construir de forma eficiente nuevos parques eólicos.

Además el modelo de dispersión de contaminantes es un instrumento que permite reproducir el comportamiento de los contaminantes en la atmósfera de manera que, partiendo de datos acerca de la emisión de éstos y considerando

aspectos meteorológicos de la zona de estudio permita predecir las medidas de inmisión.

1.2. Modelos Meteorológicos

El desarrollo de modelos meteorológicos obedece en primera instancia a la necesidad de conocimiento acerca de los fenómenos que se producen en la atmósfera, como tormentas, huracanes, etc. El estudio de la contaminación atmosférica requiere de estos modelos para proporcionar datos de entrada a la modelización de la difusión de gases y o partículas.

Tradicionalmente los modelos meteorológicos se dividen en modelos físicos y modelos matemáticos. Los primeros son aquellos que emplean túneles de viento sobre representaciones a pequeña escala del terreno en estudio. En los modelos matemáticos, por medio del análisis algebraico y del cálculo, se resuelven ecuaciones meteorológicas. Los modelos matemáticos se dividen a su vez en analíticos y numéricos, siendo estos últimos los que ofrecen mayores perspectivas, pues la gran complejidad de las ecuaciones que describen la atmósfera hacen muy difícil encontrar la solución exacta que se obtendría con los modelos analíticos.

Los modelos meteorológicos numéricos, que emplean técnicas de integración numérica para encontrar soluciones numéricas aproximadas, pueden ser diagnósticos o pronósticos. Los modelos meteorológicos numéricos de diagnóstico proporcionan datos de parámetros meteorológicos (viento, temperatura, presión...) de todo el área en estudio mediante apropiadas técnicas de interpolación y extrapolación de medidas realizadas en puntos de ese espacio. Se llaman diagnósticos porque no pueden usarse para evaluar la evolución meteorológica, simplemente proporcionan una buena estimación de una condición de

estado estacionario (o cuasi-estacionario). Se usan con frecuencia para evaluar los campos de flujo de masas consistente en orografías complicadas, pues producen resultados satisfactorios cuando el término dominante es la orografía y se dispone de suficientes medidas de datos meteorológicos.

Los modelos meteorológicos numéricos pronósticos emplean ecuaciones que son dependientes del tiempo e incorporan la física de la atmósfera y no emplean datos meteorológicos para modificar los cálculos realizados. Se trata de modelos que proporcionan datos "futuros". Es de destacar que se han hecho propuestas en el sentido de "mezclar" ambas metodologías (Hoke y Anthes, 1976).

1.2.1. Modelos Diagnósticos

A continuación se procede a dar una relación de relevantes modelos meteorológicos numéricos diagnósticos, con sus características más destacadas.

1.2.1.1. Modelo IBMAQ-2

Realiza una estimación tridimensional del vector viento en cada punto del dominio bajo estudio, primero mediante una estimación tomando como base los datos de la estación de medida más cercana. A continuación, en cada punto esos valores iniciales son corregidos como medias ponderadas con los valores adyacentes. Se emplea un factor ponderado de proporcionalidad de $\frac{1}{r^2}$, siendo r la distancia entre los puntos. Finalmente, cada nuevo cálculo del viento emplea los cuatro puntos adyacentes.

1.2.1.2. Modelo NEWEST

Proporciona campos tridimensionales del viento y de la estabilidad. Los datos de la estabilidad se interpolan usando factores ponderados proporcionales a $\frac{1}{r^4}$, factor que para los datos del viento es $\frac{1}{r^2}$, siendo r la distancia entre el punto donde se realiza la interpolación y los puntos de medida. El viento se ajusta para que cumpla la condición de masa consistente. Al final se añaden los efectos de drenaje térmico.

1.2.1.3. Modelo NOABL

Este modelo proporciona una representación precisa del terreno mediante una transformación de la coordenada vertical en la que la coordenada más baja es conforme a la superficie del terreno.

1.2.1.4. Modelo MATHEW

El modelo produce un campo de viento promedio, minimamente ajustado según la función integral

$$E(u, v, w, \lambda) = \int_v \left[\alpha_1^2 (u - u_0)^2 + \alpha_2^2 (v - v_0)^2 + \alpha_3^2 (w - w_0)^2 + \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right] dx dy dz$$

donde $u(x, y, z)$, $v(x, y, z)$ y $w(x, y, z)$ son los componentes del viento calculados por el modelo; $u_0(x, y, z)$, $v_0(x, y, z)$ y $w_0(x, y, z)$ son las medidas de las estaciones de observación; $\lambda(x, y, z)$ es el multiplicador de Lagrange; y α_1 , α_2 y α_3 son los módulos de precisión de Gauss. La integral es aplicada en todo el dominio.

1.2.1.5. Modelo Moussiopoulos-Flassak

Moussiopoulos y Flassak desarrollaron un modelo de masa consistente para el cálculo de campos de viento en orografías complejas. Las velocidades se ajustan resolviendo ecuaciones diferenciales elípticas tridimensionales transformadas a un sistema de coordenadas conformes al terreno.

1.2.1.6. Modelo de Análisis Objetivo Basado en el Método de Interpolación de Cressman

Este modelo automatiza el empleo de un método de correcciones sucesivas que interpola datos de puntos irregularmente espaciados a una malla con espaciado regular.

1.2.2. Modelos Pronósticos

Como se ha comentado anteriormente, los modelos pronósticos se usan para predecir la evolución temporal del sistema atmosférico a través de la integración en el espacio-tiempo de la ecuación de conservación de la masa, calor, movimiento, agua y si es necesario, otras sustancias como gases y aerosoles.

Las soluciones numéricas para estos modelos dependen fuertemente de las condiciones de contorno y de las condiciones iniciales. De entre los numerosos modelos desarrollados, cuatro tienen particular importancia en aplicaciones para calidad del aire: el modelo URBMET, el modelo NMM, el modelo HOTMAC y por último el modelo NCAR/PSU/SUNY.

1.3. Modelos de Difusión de Contaminantes

Estos modelos tratan, de una manera aproximada, de resolver las ecuaciones de difusión que gobiernan el movimiento de los contaminantes en el flujo turbulento atmosférico. Una primera clasificación los divide en:

- **Modelos de caja:** Los más sencillos, tratan la zona en estudio como un sistema cerrado en el que se mueven los contaminantes por impulso del valor medio del viento. Son modelos puramente mecánicos.
- **Modelos Gaussianos:** Son los más utilizados. Consideran que el penacho emitido sigue una distribución gaussiana perpendicular al movimiento convectivo principal. De este modo se pretende simular la difusión de contaminantes en la dirección no dominante. Sin embargo, no han conseguido una descripción real del fenómeno de difusión, aunque permiten obtener resultados aproximados muy rápidamente.
- **Modelos de diferencias finitas:** Tratan de resolver las ecuaciones de difusión utilizando diferentes grados de aproximación. De un lado tenemos los modelos *Eulerianos*, que a partir de un sistema de referencia fijo (habitualmente, en el foco emisor) tratan de calcular la difusión referida a este sistema a partir de diferentes aproximaciones. Por otro lado están los modelos *Lagrangianos*, que emplean dos sistemas de coordenadas para el cálculo del desplazamiento de los contaminantes: uno fijo, referido a las coordenadas del foco emisor, en el que se calcula la traslación media de los elementos de contaminante considerados; otro relativo y referido a un punto representativo de la traslación media del penacho y que tiene en

cuenta la dispersión del penacho debido a la turbulencia.

Para los modelos en diferencias finitas, las dos soluciones propuestas son alternativas válidas al mismo problema y, además, se ha demostrado que aplicando las mismas aproximaciones en las dos vías con el fin de obtener una solución analítica, el resultado es el mismo: la ecuación de difusión gaussiana. Podemos ver gráficamente su relación en la figura (1.3), sin embargo, fuera de estas aproximaciones, sus resultados y sus posibilidades de aplicación son muy diferentes.

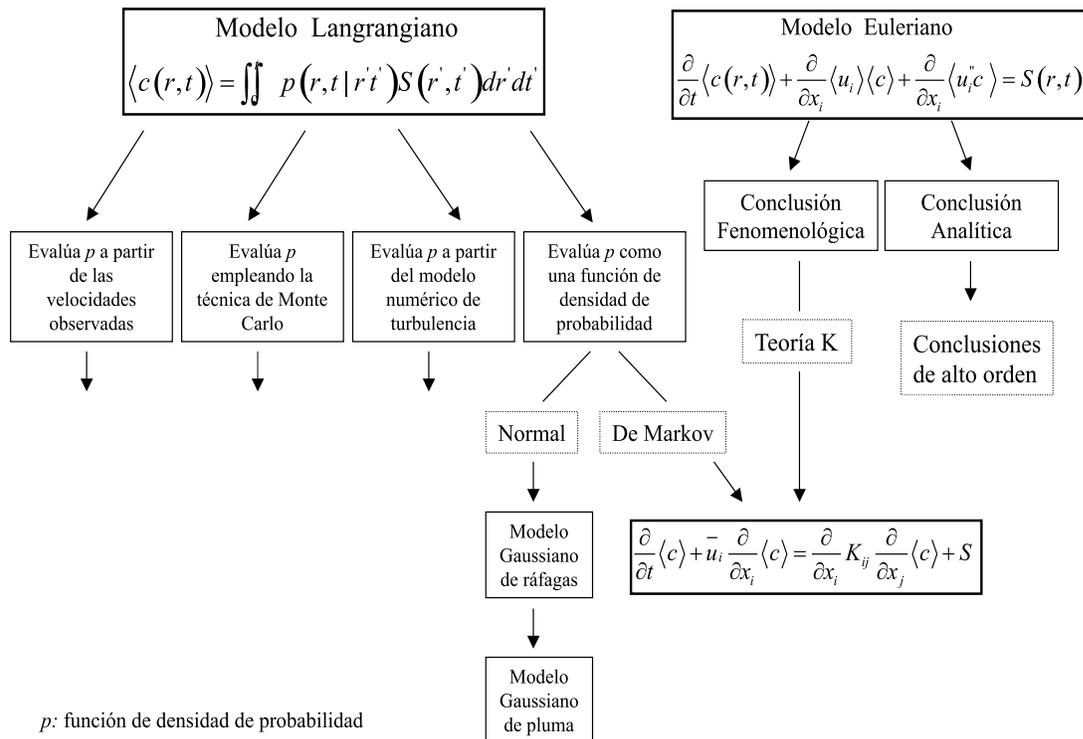


Figura 1.1: Esquema de la relación entre el modelo de difusión Euleriano y el modelo Langrangiano

Como conclusión, podemos destacar el gran número y variedad de alternativas aplicadas en la representación del flujo de contaminantes en la atmós-

fera, lo que nos lleva a pensar que no nos encontramos ante un único problema, puesto que la elección de una u otra solución depende fundamentalmente de las escalas de espacio y tiempo exigidas: las aproximaciones habitualmente consideradas para el tratamiento de la turbulencia implican distintos grados de isotropía del medio. Estas aproximaciones no representan exactamente el comportamiento de la atmósfera real, y su desviación depende de las condiciones meteorológicas (estabilidad), del tamaño de la región considerada y de las escalas de tiempo de predicción y de tiempo de promedio de esa predicción exigidas. Estos tres tipos de factores son los que condicionan la elección de uno u otro modelo de difusión para cada caso particular.

1.3.1. La Aproximación Euleriana

Aunque la ecuación de difusión atmosférica puede resolverse analíticamente si se establecen las hipótesis convenientes, para su aplicación en la modelización de sistemas atmosféricos reales los modelos eulerianos adoptan generalmente técnicas de resolución numérica que permiten reducir las hipótesis a aplicar, o utilizar funciones más realistas para aquellos parámetros de la ecuación para los que no se conoce su forma o función.

Podemos considerar la ecuación de difusión como una combinación de tres operadores matemáticos:

- El operador difusión: $\nabla \cdot K \cdot \nabla c_i$
- El operador advección: $u \cdot c_i$
- El operador cinética química: $R_i(c)$

Estas tres funciones, que representan procesos distintos a combinar, tienen formas muy diferentes, lo que hace que la resolución numérica más adecuada para la forma de una de las funciones no lo sea para las otras. Especialmente, las ecuaciones cinéticas suelen ser no lineales, y además las velocidades a especificar para cada especie pueden diferenciarse en varios órdenes de magnitud, lo que provoca un comportamiento Stiffness del sistema de ecuaciones diferenciales resultante; este tipo de sistemas de ecuaciones Stiff ha sido resuelto numéricamente mediante métodos específicos (Hindmarsh, 1980). También, el operador advección presenta dificultades de resolución numérica, puesto que el transporte medio del contaminante está gobernado por campos de vientos que no suelen presentar gradientes continuos.

Las características de cada operador, así como las condiciones de contorno (vientos, turbulencia, etc) pueden aconsejar la aplicación de un método u otro. En general, sin embargo, los métodos de diferencias finitas, con diversas modificaciones, son los más extendidos.

1.3.1.1. Métodos de diferencias finitas

Sobre una malla discreta que cubre todo el entorno de interés, se considera que las derivadas parciales de las funciones (aplicables en la ecuación de difusión) se pueden aproximar a cocientes de diferencias, de la forma:

$$\begin{aligned}\frac{\partial c}{\partial x} &= \frac{c_j - c_{j-1}}{\Delta x} \\ \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} &= \frac{c_{j+1} - 2c_j + c_{j-1}}{\Delta x^2}\end{aligned}$$

siendo Δx la distancia entre dos puntos vecinos de la rejilla en la dirección x , y j el índice que se refiere al valor de la variable (c_j) en el punto de la rejilla en el que se desee calcular la derivada parcial.

Existen diferentes variantes de estas expresiones discretas de las derivadas parciales que llevan a diferentes soluciones, como los métodos mixtos, que solo calculan las derivadas más significativas, y mantienen constantes los valores de otras en períodos de tiempo más largos; la aplicación de estas variantes, la resolución de la malla (Δx) y el paso de tiempo discreto Δt aplicado en la solución de las ecuaciones, condicionan la estabilidad de la solución y, por tanto, la capacidad de resolver el problema concreto.

1.3.1.2. Métodos de elementos finitos

En el método de elementos finitos, la malla de solución está compuesta por elementos compuestos generalmente por el mismo número de vértices y aristas, pero que pueden adoptar formas diferentes; es decir, la malla puede adaptarse mejor a formas irregulares, como la orografía del terreno que delimita la capa de aire inferior, o la forma de un penacho concreto. Estos métodos exigen la definición de una función polinomial que aproxima el valor de las variables de la ecuación para cada uno de los elementos finitos.

Como resultado se llega un sistema de ecuaciones diferenciales, más complejas de resolver numéricamente que en el caso del método de diferencias finitas; por ello, no es una solución muy común de la ecuación de difusión.

1.3.2. La Aproximación Lagrangiana

La aplicación de los modelos lagrangianos presenta más variantes que la de los modelos eulerianos, basadas generalmente en la definición de los sistemas de referencia móviles asociados a cada cantidad de contaminante y la distribución del contaminante dentro del sistema de referencia.

En general, podemos distinguir tres variantes diferentes:

- Modelos de segmentos.
- Modelos de estructuras (puffs).
- Modelos de partículas (PIC).

Los modelos de segmentos representan el penacho de contaminantes como una serie de segmentos discretos que sumados, cubren todo el volumen del penacho. Cada segmento es un sistema de referencia parcialmente independiente, puesto que tiene que mantenerse unido al anterior y al siguiente. La distribución de contaminante en el interior de cada segmento suele ser de tipo gaussiana. Los modelos de segmentos pueden representar situaciones de viento fuerte, pero no situaciones de relativa calma. En la práctica, han sido superados por los modelos de estructuras, puesto que éstas pueden desplazarse libremente, movidas únicamente por el campo de vientos del entorno.

Los modelos de estructuras permiten definir la distribución de contaminante en el interior de la estructura de muy diferentes formas, según convenga. Tradicionalmente, se han tomado como base las funciones de distribución gaussianas para este propósito puesto que, como hemos visto, la solución gaussiana se obtiene analíticamente de la ecuación de difusión mediante la aplicación de algunas hipótesis.

Los modelos de partículas utilizan como representaciones matemáticas de los contaminantes partículas matemáticas que, se considera, contienen una cantidad de contaminante dada; no se plantea, por tanto, la distribución de contaminante alrededor de cada partícula, dado que la cantidad de contaminante en un volumen considerado vendrá dada por el número de partículas contenidas en ese volumen. Esto permite que la distribución de contaminante en el entorno pueda adoptar cualquier forma, siempre que se utilicen el suficiente

número de partículas para alcanzar una representación estadísticamente próxima a la aleatoriedad. Esto implica que el tiempo de cálculo que requieren estos modelos es muy alto, y solo en los últimos años están resultando de aplicación práctica.

1.4. Objetivos de la Tesis

Los objetivos de esta tesis son:

- Desarrollo de un sistema de generación de mallas de elementos hexaédricos teniendo en cuenta la orografía real del terreno, y donde el mallado vertical sea variable, para permitir un mejor refinamiento en las cercanías del terreno y mejorar el orden en los esquemas en diferencias finitas.
- Desarrollo de un modelo tridimensional en diferencias finitas para ajuste de campos de viento a partir de datos experimentales que considere la orografía del terreno y parámetros de estabilidad atmosférica.
- Desarrollo de un modelo tridimensional para el transporte de contaminantes en la atmósfera, aplicando una formulación de Taylor-Galerkin para la ecuación de transmisión-difusión con varias especies acopladas, incorporando sus reacciones químicas y los efectos de la deposición seca y húmeda.
- Elaboración de códigos informáticos de los modelos desarrollados.
- Elaboración de un manual de usuario para los programas elaborados, permitiendo así la utilización del programa a cualquier persona sin que posea necesariamente un alto conocimiento en el área.

- Validar los modelos realizados mediante aplicaciones numéricas en las Islas Canarias.
- Análisis gráfico de los datos obtenidos mediante esas aplicaciones numéricas empleando el sistema AVS.

1.5. Estructura de la Memoria

Para finalizar esta introducción, presentamos, a modo de resumen, una serie de comentarios acerca del contenido de cada uno de los capítulos que conforman esta memoria de tesis.

- En el capítulo dos, se desarrolla un modelo en tres dimensiones para un ajuste de campos de vientos para cada paso de tiempo.
- En el capítulo tres, a partir del campo de velocidades de viento obtenidos en el modelo anterior, construimos el modelo de dispersión de contaminantes en la atmósfera.
- En el capítulo cuatro validamos nuestros modelos con unos experimentos numéricos a partir de datos tomados en estaciones de medida.

Finalmente se presentan las conclusiones a las que se ha llegado en este trabajo.

Capítulo 2

Modelización de Campos de Viento

En este capítulo se desarrolla un modelo del tipo de masa consistente para ajuste de campos de viento en tres dimensiones, en cada instante de tiempo a partir de medidas experimentales. El modelo sirve tanto de herramienta generadora de mapas de vientos de una zona determinada, como de preproceso para un modelo de dispersión de contaminantes en la atmósfera. Asimismo se propone una malla regular en las direcciones horizontales y variable en la vertical.

2.1. Ecuaciones Constitutivas

La ecuación de continuidad de masa sobre el dominio tridimensional a estudiar Ω y la condición de impenetrabilidad sobre Γ_b (terreno y frontera superior del dominio) son, respectivamente

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \text{ en } \Omega \quad (2.1)$$

$$\vec{n} \cdot \vec{u} = 0 \text{ en } \Gamma_b \quad (2.2)$$

asumiendo que la densidad del aire es constante en todo el dominio.

A partir de estas condiciones, los modelos de masa consistente plantean un problema de mínimos cuadrados en el dominio Ω con las velocidades a ajustar $\vec{u}(\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w})$ a partir de las observadas $\vec{v}_0(u_0, v_0, w_0)$,

$$E(\tilde{u}, \tilde{v}, \tilde{w}) = \int_{\Omega} [\alpha_1^2 ((\tilde{u} - u_0)^2 + (\tilde{v} - v_0)^2) + \alpha_2^2 (\tilde{w} - w_0)^2] d\Omega \quad (2.3)$$

siendo α_1 y α_2 los módulos de precisión de Gauss, considerados idénticos para las direcciones horizontales. Entonces el campo buscado $\vec{v}(u, v, w)$ será la solución del problema:

“Encontrar $\vec{v} \in K$ tal que,

$$E(\vec{v}) = \min_{\vec{u} \in K} E(\vec{u}), K = \langle \vec{u}; \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0, \vec{n} \cdot \vec{u}|_{\Gamma_b} = 0 \rangle” \quad (2.4)$$

Este problema es equivalente a encontrar el punto silla (\vec{v}, ϕ) del Lagrangiano, [72]

$$\Upsilon(\vec{v}) = \min_{\vec{u} \in K} E(\vec{u}) + \int_{\Omega} \phi \vec{\nabla} \cdot \vec{u} d\Omega \quad (2.5)$$

La técnica de los multiplicadores de Lagrange permite obtener el mínimo de la expresión (2.5), cuya solución viene dada por las ecuaciones de Euler-Lagrange,

$$u = u_0 + T_h \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (2.6)$$

$$v = v_0 + T_h \frac{\partial \phi}{\partial y} \quad (2.7)$$

$$w = w_0 + T_v \frac{\partial \phi}{\partial z}, \quad (2.8)$$

siendo ϕ el multiplicador de Lagrange y $T = (T_h, T_h, T_v)$ el tensor diagonal de

transmisión

$$T_h = \frac{1}{2\alpha_1^2} \quad \text{y} \quad T_v = \frac{1}{2\alpha_2^2} \quad (2.9)$$

Si α_1 y α_2 se consideran constantes en todo el dominio, la formulación variacional conduce a una ecuación elíptica en ϕ . Sustituyendo las ecuaciones (2.6), (2.7) y (2.8) en la ecuación (2.1) tenemos

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_h \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_h \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(T_v \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) = - \left(\frac{\partial u_0}{\partial x} + \frac{\partial v_0}{\partial y} + \frac{\partial w_0}{\partial z} \right) \quad \text{en } \Omega \quad (2.10)$$

que se completa con la condición de Dirichlet nula en las fronteras permeables (fronteras verticales del dominio)

$$\phi = 0 \quad \text{en } \Gamma_a \quad (2.11)$$

y la condición de Neumann en las impermeables (terreno y frontera superior)

$$\vec{n} \cdot T \vec{\nabla} \phi = -\vec{n} \cdot \vec{v}_0 \quad \text{en } \Gamma_b \quad (2.12)$$

Obsérvese que en la frontera superior, al ser el campo inicial \vec{v}_0 horizontal, la condición (2.12) se transforma en

$$\vec{n} \cdot T \vec{\nabla} \phi = 0 \quad (2.13)$$

Al considerar T_h y T_v constantes, la ecuación (2.10) se convierte en

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{T_v}{T_h} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = - \frac{1}{T_h} \left(\frac{\partial u_0}{\partial x} + \frac{\partial v_0}{\partial y} + \frac{\partial w_0}{\partial z} \right) \quad (2.14)$$

2.1.1. Módulos de Precisión de Gauss

Todas las simulaciones realizadas con modelos de masa consistente muestran que estos códigos son muy sensibles a los valores elegidos para α_1 y α_2 . Por consiguiente debe prestarse especial atención a este problema.

El funcional a minimizar viene dado por (2.3). Si dividimos por un valor constante, por ejemplo α_2^2 , éste no resulta distinto excepto a efectos numéricos. Se introduce entonces un parámetro único

$$\alpha^2 = \frac{\alpha_1^2}{\alpha_2^2} = \frac{T_v}{T_h} \quad (2.15)$$

Obsérvese que los coeficientes α_1^2 y α_2^2 son los pesos de los ajustes horizontal y vertical de las componentes de la velocidad. Así para $\alpha \gg 1$ predomina el ajuste del flujo en la dirección vertical, es decir, el aire tiende a sobrepasar la barrera del terreno más que a pasar alrededor de ella (ver figura 2.1). Mientras que para $\alpha \ll 1$, el ajuste del flujo ocurre primeramente en el plano horizontal, por tanto el aire pasará alrededor de la barrera del terreno más que sobre ella (ver figura 2.2).

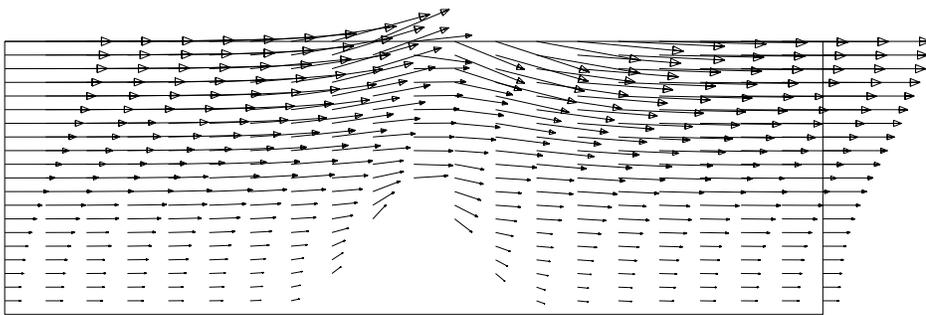


Figura 2.1: Módulos de precisión de Gauss para $\alpha \gg 1$

En particular, $\alpha \rightarrow \infty$ significa ajuste vertical puro, mientras $\alpha \rightarrow 0$ significa

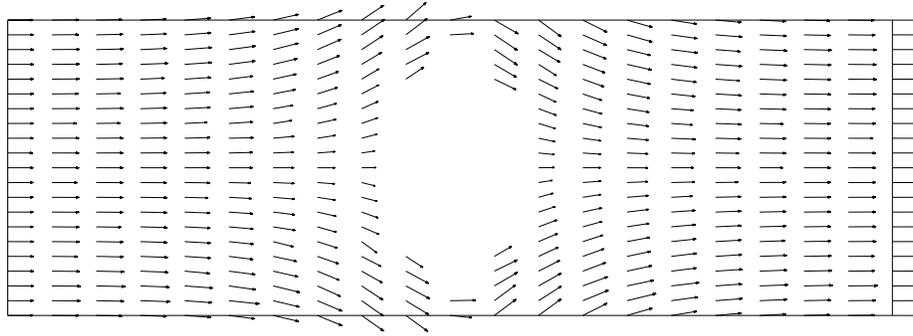


Figura 2.2: Módulos de precisión de Gauss para $\alpha \ll 1$

ajuste horizontal puro [28].

2.2. Coordenadas Conformes al Terreno

La transformación a coordenadas conformes propuesta viene definida por el siguiente cambio de variables,

$$\xi = \frac{x}{x_l} \quad (2.16)$$

$$\eta = \frac{y}{y_l} \quad (2.17)$$

$$\sigma = \frac{z - z_e}{z_t - z_s} = \frac{z - z_s}{\pi} \quad (2.18)$$

Siendo z_t la altura máxima del dominio, $z_s(x, y)$ una función definida por la topografía del terreno, y x_l, y_l , las dimensiones horizontales máximas. Éstas nos permitirán construir un dominio tridimensional cúbico unitario, donde el terreno está definido por un plano horizontal.

Las coordenadas conformes permiten además condiciones de contorno más simples y el uso del espaciado vertical variable, con mayor resolución cerca de la superficie del terreno, todo ello sin penalizar el rendimiento.

Las derivadas parciales definidas por el cambio de variable son

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{1}{x_l} \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial y} = 0 \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial z} = 0 \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial x} = 0 \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial y} = \frac{1}{y_l} \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial z} = 0 \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = \frac{\partial \sigma}{\partial z_s} \frac{\partial z_s}{\partial x} = \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x} \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial y} = \frac{\partial \sigma}{\partial z_s} \frac{\partial z_s}{\partial y} = \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y} \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial z} = \frac{1}{\pi} \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} = \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + \frac{2(\sigma - 1)}{\pi^2} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial y^2} = \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + \frac{2(\sigma - 1)}{\pi^2} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial z^2} = 0 \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial x \partial y} = \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial^2 z_s}{\partial x \partial y} + 2 \left(\frac{\sigma - 1}{\pi^2} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y} \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial x \partial z} = \frac{1}{\pi^2} \frac{\partial z_s}{\partial x} \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial y \partial z} = \frac{1}{\pi^2} \frac{\partial z_s}{\partial y} \quad (2.33)$$

Sustituyendo las derivadas anteriores en las de la función ϕ obtenemos

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{1}{x_l} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} = \frac{1}{x_l} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial x} \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{1}{y_l} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial y} = \frac{1}{y_l} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial y} \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} = \frac{1}{\pi} \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \quad (2.36)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} &= \frac{1}{x_l^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} + \frac{2}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial x} + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} \\ &\quad + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\sigma - 1}{\pi^2} \right) \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} &= \frac{1}{y_l^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} + \frac{2}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta \partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial y} + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} \\ &\quad + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + 2 \left(\frac{\sigma - 1}{\pi^2} \right) \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = \frac{1}{\pi^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} &= \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} + \frac{1}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial y} + \frac{1}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta \partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial x} \\
&+ \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(\frac{\partial^2 z_s}{\partial x \partial y} + \frac{2}{\pi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \\
&+ \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y}
\end{aligned} \tag{2.40}$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial z} = \frac{1}{\pi^2} \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial x} + \frac{1}{x_l} \frac{1}{\pi} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \sigma} + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi^2} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} \frac{\partial z_s}{\partial x} \tag{2.41}$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y \partial z} = \frac{1}{\pi^2} \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial y} + \frac{1}{y_l} \frac{1}{\pi} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta \partial \sigma} + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi^2} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} \frac{\partial z_s}{\partial y} \tag{2.42}$$

Por tanto, a partir de las expresiones (2.37), (2.38) y (2.39), multiplicando ambos miembros de la ecuación (2.14) por π , resulta

$$\begin{aligned}
&\frac{\pi}{x_l^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} + \frac{\pi}{y_l^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} + \left[\frac{(\sigma - 1)^2}{\pi} \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) + \frac{T_v}{T_h} \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} \\
&+ 2(\sigma - 1) \left[\frac{1}{x_l} \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \sigma} + \frac{1}{y_l} \frac{\partial z_s}{\partial y} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta \partial \sigma} \right] \\
&+ (\sigma - 1) \left[\frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + \frac{2}{\pi} \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) \right] \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \\
&= -\frac{1}{T_h} \left[\pi \left(\frac{1}{x_l} \frac{\partial u_0}{\partial \xi} + \frac{1}{y_l} \frac{\partial v_0}{\partial \eta} \right) + (\sigma - 1) \left(\frac{\partial u_0}{\partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial x} + \frac{\partial v_0}{\partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{\partial w_0}{\partial \sigma} \right]
\end{aligned} \tag{2.43}$$

2.3. Condiciones de Contorno

La condición de Dirichlet nula en las fronteras permeables

$$\phi = 0 \text{ en } \Gamma_a \quad (2.44)$$

no se altera con la transformación a coordenadas conformes, mientras que la condición (de impenetrabilidad) en la frontera superior resulta

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0 \implies \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} = 0 \quad \text{con } \pi \neq 0 \quad (2.45)$$

$$\vec{n} = \left(\frac{\partial z_s}{\partial x}, \frac{\partial z_s}{\partial y}, -1 \right) \quad (2.46)$$

$$\vec{n} \cdot T \vec{\nabla} \phi = -\vec{n} \cdot \vec{v}_0 \quad (2.47)$$

$$T_h \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial x} + T_h \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial z_s}{\partial y} - T_v \frac{\partial \phi}{\partial z} = - \left[u_0 \frac{\partial z_s}{\partial x} + v_0 \frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0 \right] \quad (2.48)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \sigma} = - \frac{\pi \left(u_0 \frac{\partial z_s}{\partial x} + v_0 \frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0 \right) + \pi \left(\frac{1}{x_l} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} + \frac{1}{y_l} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right)}{(\sigma - 1) \left[\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right] - \frac{T_v}{T_h}} \quad (2.49)$$

En el terreno, donde también se cumple la condición de Neumann y teniendo en cuenta que $\sigma = 0$, tenemos que

$$\frac{\partial \phi}{\partial \sigma} = \frac{\frac{\pi}{T_h} \left[\left(u_0 + T_h \frac{1}{x_l} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x} + \left(v_0 + T_h \frac{1}{y_l} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0 \right]}{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + \frac{T_v}{T_h}} \quad (2.50)$$

Estas tres condiciones se pueden expresar de forma general como,

$$A\phi + B \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} = C \frac{\frac{\pi}{T_h} \left[\left(u_0 + \frac{1}{x_l} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x} + \left(v_0 + \frac{1}{y_l} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0 \right]}{\left[\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right] + \frac{T_v}{T_h}} \quad (2.51)$$

De tal forma que :

- Si $A = 1$, $B = 0$, $C = 0$, entonces se obtiene la ecuación (2.44).
- Si $A = 0$, $B = 1$, $C = 0$, entonces se obtiene la ecuación (2.45).
- Si $A = 0$, $B = 1$, $C = 1$, entonces se obtiene la ecuación (2.50).

2.4. Construcción del Campo Inicial

Para la construcción del campo inicial partimos de los valores de la velocidad del viento y de su dirección obtenidos en las estaciones de medida. El campo inicial \vec{v}_0 se construye en dos etapas. Primero se calcula mediante *interpolación horizontal* el valor de \vec{v}_0 en los puntos del dominio situados a la misma altura z_s (sobre el terreno) que las estaciones de medida. Con esta información se realiza una *extrapolación vertical* para definir el campo de velocidades en todo el dominio.

2.4.1. Análisis de Las Medidas de Las Estaciones

En nuestro trabajo realizaremos las interpolaciones a partir de estaciones de medida ubicadas en el dominio de estudio. Cada estación de medida proporciona la velocidad (en m/s) y dirección del viento a 10 metros del suelo. La dirección del viento viene dada en grados sexagesimales medidos en sentido horario y tomando como referencia la dirección norte. Así el norte se corresponde a 0 grados, el sur a 180 grados, el este a 90 grados y el oeste a 270 grados. Para poder utilizar los datos de viento de las estaciones en el modelo atmosférico es necesario hacer un cambio que sirva para obtener el ángulo medido en sentido antihorario y tomando como referencia el semieje positivo horizontal.

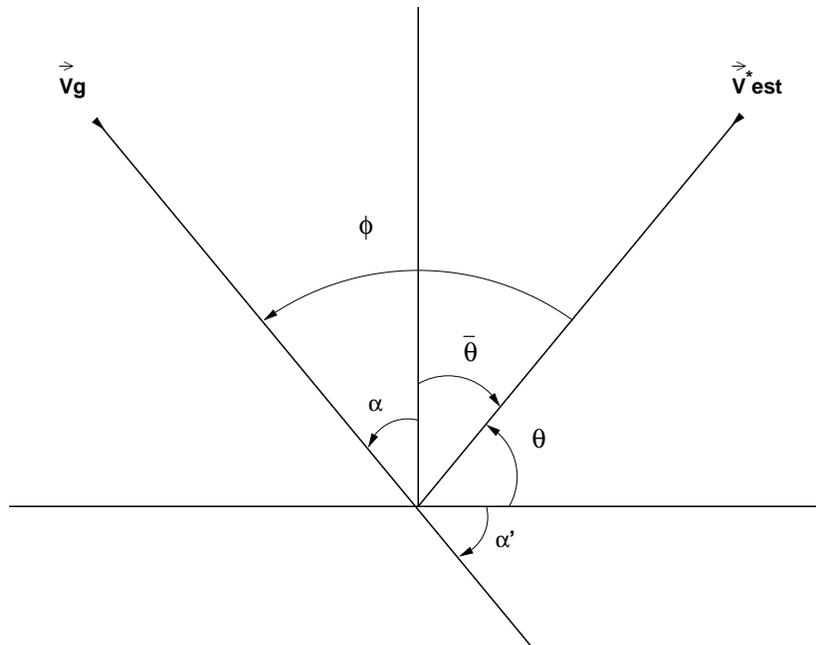


Figura 2.3: Ángulo de desviación del viento sobre la superficie respecto al viento geostrófico.

El cambio se realiza de la siguiente manera (ver figura 2.3),

$$\alpha = \bar{\theta} - \phi$$

$$\alpha' = 270 - \alpha$$

o de una manera más simplificada

$$\alpha' = 180 + \theta + \phi$$

donde, $\bar{\theta}$ es el ángulo tomado por las estaciones de medida en grados norte en sentido horario y θ es su complemento. Asumimos que el viento sobre la superficie gira un ángulo ϕ con respecto a la dirección de \vec{V}_g (Viento geostrófico), α es el ángulo respecto a la vertical y, por último α' es el ángulo que queremos obtener en sentido antihorario sobre la horizontal.

2.4.2. Definición de las Variables del Modelo

2.4.2.1. Estabilidad Atmosférica

Este concepto está relacionado tanto con la turbulencia atmosférica como con el gradiente vertical de temperatura y las situaciones de inversión térmica. La estabilidad atmosférica nos proporciona una medida cualitativa de las variaciones de la densidad del aire, debidas a los cambios de presión y temperatura y que influyen en determinados movimientos atmosféricos.

Las condiciones atmosféricas pueden clasificarse como:

- **Estable:** Si una masa de aire sube se encontrará rodeada de aire más caliente y, por tanto, menos denso que ella, lo que la hará bajar; y si baja,

se encontrará rodeada de aire más frío (menos denso), y tenderá a subir. Esta tendencia que tiene el aire de permanecer en la misma capa es lo que se denomina estabilidad de la estratificación atmosférica.

- **Inestable:** En condiciones inestables la temperatura potencial disminuye con la altura, incrementándose los movimientos verticales, es decir si el aire sube se encontrará rodeado de aire más frío y denso que él, y tenderá a seguir subiendo; y si baja se encontrará con aire más caliente y ligero, y tenderá a seguir bajando.
- **Neutra:** Si un volumen de aire (después de un desplazamiento vertical en una capa atmosférica sin mezclar con el aire circundante) experimenta una fuerza neta vertical nula, los movimientos ascensionales no se verán perturbados por el gradiente térmico, entonces la capa atmosférica se asume neutralmente estratificada. Bajo tales condiciones, dicho volumen ni tiende a volver a su posición original (estratificación estable) ni acelera alejándose de ella (estratificación inestable).

2.4.2.2. Clase de Estabilidad de Pasquill

La estabilidad atmosférica puede ser caracterizada por varios métodos, siendo el de Pasquill el esquema más utilizado (ver tabla 2.1).

CLASE DE ESTABILIDAD DE PASQUILL		a	b
Día	A (Extremadamente Inestable)	-0.08750	-0.1029
	B (Moderadamente Inestable)	-0.03849	-0.1714
	C (Ligeramente Inestable)	-0.00807	-0.3049
Día/Noche	D (Neutra)	0.00000	0.0000
Noche	E (Ligeramente Estable)	0.00807	-0.3049
	F (Moderadamente Estable)	0.03849	-0.1714
	G (Extremadamente Estable)	0.8750	-0.1029

Tabla 2.1: Clase de estabilidad de Pasquill

2.4.2.3. Función Universal del Perfil del Viento en La Capa Superficial Φ_m

Los valores de Φ_m dependen de la estabilidad del aire [74],

$$\begin{aligned}
 \Phi_m &= 0 && \text{(neutra)} \\
 \Phi_m &= -5\frac{z}{L} && \text{(estable)} \\
 \Phi_m &= \log \left[\left(\frac{\theta^2 + 1}{2} \right) \left(\frac{\theta + 1}{2} \right)^2 \right] - 2 \arctan \theta + \frac{\pi}{2} && \text{(inestable)}
 \end{aligned}
 \tag{2.52}$$

donde

$$\theta = \left(1 - 16\frac{z}{L} \right)^{1/4}
 \tag{2.53}$$

siendo L la longitud de Monin-Obukov, que se calcula a través de la fórmula de Liu [49],

$$\frac{1}{L} = az_0^b
 \tag{2.54}$$

con a y b , definidas por la clase de estabilidad de Pasquill.

2.4.2.4. Parámetro de Coriolis

El parámetro $f = 2\Theta \text{sen } \phi$ se denomina de Coriolis, siendo $\Theta = 7,292 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ la velocidad de rotación de la Tierra y ϕ la latitud. Se considera positiva en el hemisferio norte, nula en el ecuador y negativa en el hemisferio sur.

2.4.2.5. Capa Límite Planetaria z_{pbl}

Es la capa de la atmósfera, situada por debajo de la atmósfera libre, que está afectada directamente por la fricción de la superficie de la tierra (conocida también como capa límite atmosférica). La altitud de la capa límite planetaria z_{pbl} sobre el terreno se ha tomado tal que la dirección e intensidad del viento es constante a partir de esa altura [60],

$$z_{pbl} = \frac{\gamma |\tilde{\mathbf{v}}^*|}{f} \quad (2.55)$$

siendo γ una constante comprendida entre 0,15 y 0,3 que depende de la estabilidad de la atmósfera.

2.4.2.6. Capa de Mezcla

También llamada capa límite convectiva, es la capa límite atmosférica sujeta a fenómenos convectivos causados por el calor superficial. El aire está bien mezclado, es decir el viento y el potencial de temperatura son prácticamente constantes con la altura. La altitud de la Capa de Mezcla h se considerará igual a z_{pbl} para condiciones neutras e inestables. En condiciones estables se aproxima por

$$h = \gamma' \sqrt{\frac{|\tilde{\mathbf{v}}^*| L}{f}} \quad (2.56)$$

siendo $\gamma' = 0,4$ [74].

2.4.2.7. Capa Superficial z_{sl}

Es la capa baja, dentro de la capa límite planetaria, inmediatamente adyacente a la capa de la superficie de la tierra, en la que la fuerza de arrastre de fricción es dominante. Conocido el valor de la altura de la capa de mezcla h , la altitud de la capa de la superficie se fija como [74],

$$z_{sl} = \frac{h}{10} \quad (2.57)$$

2.4.2.8. Longitud de Rugosidad

El concepto de longitud de rugosidad z_0 se introduce al derivar el perfil vertical del viento de la teoría K , en la que se introduce una altura diferente de $z = 0$ donde la velocidad del viento disminuye. El valor de z_0 depende de las características del terreno, una de las formas de estimarla es mediante valores estándar para diferentes tipos de terreno, ver figura (2.4).

Otra manera de definirla es la altura por encima del suelo a la que, en teoría de la capa superficial, la velocidad del viento es cero. Se define como $z_0 = \frac{e}{30}$, donde e es la altura media de los obstáculos en la zona de estudio [36],

2.4.2.9. Velocidad de Fricción

En el flujo turbulento atmosférico las fuerzas que se oponen al movimiento están caracterizadas por la acción que ejercen las rugosidades o asperezas propias de la orografía del terreno. La velocidad de fricción se obtiene en cada punto a partir de las medidas interpoladas a la altura de las estaciones (*interpolación horizontal*),

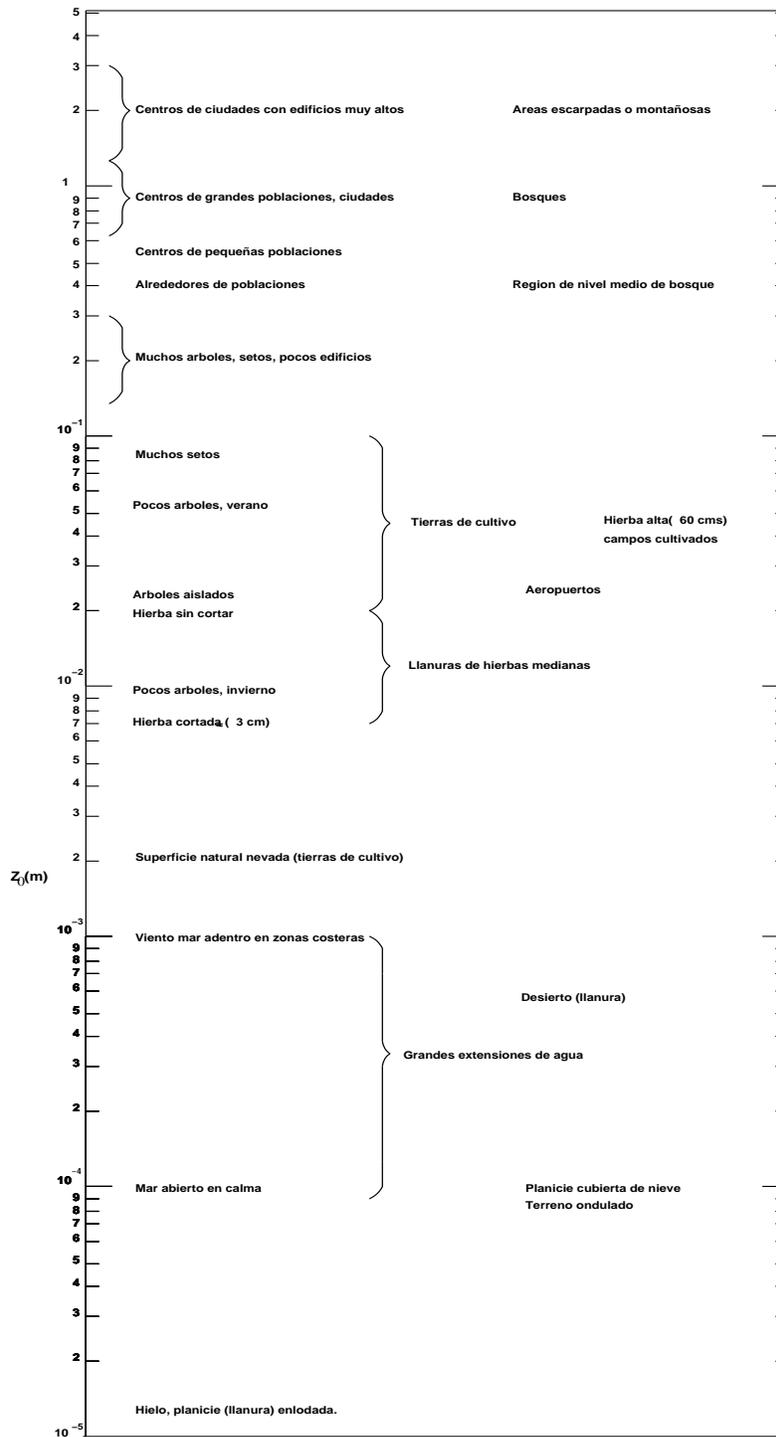


Figura 2.4: Longitud de rugosidad, valores aproximados de z_0 para distintos tipos de terreno. Por Mc Rae (1982)

$$\tilde{\mathbf{v}}^* = \frac{k \tilde{\mathbf{v}}_0(z_e)}{\ln \frac{z_e}{z_0} - \Phi_m} \quad (2.58)$$

2.4.2.10. Viento Geostrófico

El viento se desarrolla, en primer lugar, como consecuencia de diferencias espaciales en la presión atmosférica. Estas diferencias de presión normalmente son causadas por una diferente absorción de la radiación solar.

En un plano horizontal, el viento fluye de las zonas de alta presión a zonas de baja presión y verticalmente de zonas de baja presión a zonas de alta presión. La velocidad del viento es proporcional al cambio de presión por unidad de distancia o gradiente de presión. Las zonas con presiones similares se representan en los mapas meteorológicos unidas mediante líneas imaginarias denominadas isobaras. Cuanto más juntas están unas isobaras, mayor será la fuerza del viento. Un segundo factor que afecta el movimiento del aire es la fuerza de Coriolis, debida a la rotación terrestre, ya definida anteriormente.

En tercer lugar puede aparecer una aceleración centrípeta, cuando el viento gira en torno a un centro. Por último, aparece la fricción debida al desplazamiento del aire. Los vientos influenciados por el gradiente de presión y la fuerza de Coriolis se denominan vientos geostróficos.

El viento geostrófico es una buena aproximación al viento real con flujo uniforme en la alta atmósfera (atmósfera libre), donde la fricción y aceleraciones no son importantes. La forma general de la expresión usada para el viento geostrófico es la bien conocida Ley de resistencia geostrófica (*geostrophic drag law*) [49].

$$|\vec{V}_g| = \frac{|\tilde{\mathbf{v}}^*|}{k} \sqrt{\left(\ln \frac{|\tilde{\mathbf{v}}^*|}{f z_0} - A\right)^2 + B^2} \quad (2.59)$$

Los valores de los coeficientes A y B tienden a ser $\sim 1,8$ y $\sim 1,5$ respectivamente, que son valores aceptables para condiciones neutras de estabilidad atmosférica.

El viento en la superficie se supone que gira un ángulo ϕ con respecto a \vec{V}_g , dado por la relación

$$\phi = \sin^{-1} \left(\frac{-B|\tilde{\mathbf{v}}^*|}{k|\vec{V}_g|} \right) \quad (2.60)$$

Para $\frac{z}{z_{pbl}} \ll 1$, la expresión para $\tilde{\mathbf{v}}_0$ en la ecuación (2.58) tiene la forma logarítmica usual y se reduce a una ley de resistencia uni-dimensional (*one-dimensional drag law*). Cuando $z \rightarrow z_{pbl}$ la ley de resistencia neutral (*neutral drag law*) puede escribirse

$$\vec{V}_{gx} = \frac{|\tilde{\mathbf{v}}^*|}{k} \left(\ln \frac{z_{pbl}}{z_0} - 2 \right) \quad (2.61)$$

$$\vec{V}_{gy} = -12|\tilde{\mathbf{v}}^*| \quad (2.62)$$

$$|\vec{V}_g| = \sqrt{\vec{V}_{gx}^2 + \vec{V}_{gy}^2} \quad (2.63)$$

$$\phi = \tan^{-1} \left(\frac{\vec{V}_{gy}}{\vec{V}_{gx}} \right) \quad (2.64)$$

donde \vec{V}_{gx} y \vec{V}_{gy} son sus componentes en un sistema de coordenadas alineado con el viento de superficie [60].

2.4.3. Interpolación Horizontal

La técnica más común de interpolación se formula en términos de la inversa de la distancia al cuadrado entre el punto y la estación de medida [16]. Sin embargo, otros autores usan simplemente la altitud de los puntos de medida [45]. Aquí se propone una fórmula que tiene en cuenta ambas consideraciones,

$$\tilde{v}_0(z_e) = \varepsilon \frac{\sum_{n=1}^N \frac{\tilde{v}_n}{d_n^2}}{\sum_{n=1}^N \frac{1}{d_n^2}} + (1 - \varepsilon) \frac{\sum_{n=1}^N \frac{\tilde{v}_n}{|\Delta h_n|}}{\sum_{n=1}^N \frac{1}{|\Delta h_n|}} \quad (2.65)$$

El valor de \tilde{v}_n corresponde a la velocidad observada en la estación n , N es el número de estaciones utilizadas en la interpolación, d_n es la distancia *horizontal* desde la estación n al punto donde estamos calculando la velocidad del viento, $|\Delta h_n|$ es la diferencia de altura entre la estación n y el punto en estudio, y ε es un parámetro de peso que toma valores entre 0 y 1. Cuando $\varepsilon \rightarrow 1$ aumenta la importancia de la distancia horizontal desde cada punto a las estaciones de medida. Esta aproximación se emplea en problemas con una orografía regular o en análisis bidimensionales. De manera análoga, si $\varepsilon \rightarrow 0$ es entonces la diferencia de altura entre cada punto y las estaciones de medida la que resulta determinante, en detrimento de la distancia horizontal. Esta segunda aproximación es la que se usa cuando la orografía del terreno es irregular. En la práctica, las regiones geográficas estudiadas suelen combinar zonas de orografía irregular con otras de orografía mas regular, por lo que tomar un valor intermedio para ε suele ser lo mas apropiado.

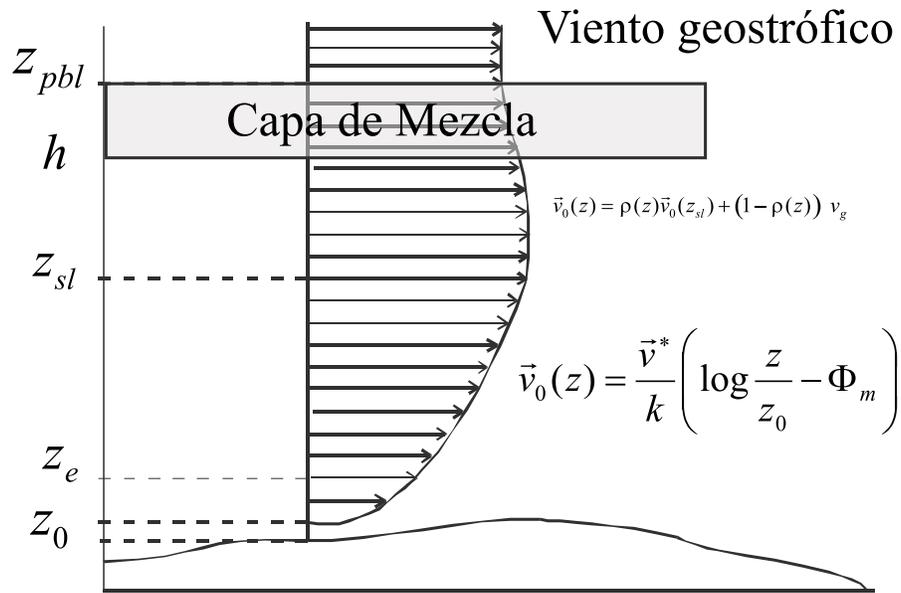


Figura 2.5: Perfil vertical del viento

2.4.4. Extrapolación Vertical

Como se muestra en la gráfica (2.5), se considera un perfil logarítmico-lineal [28] en la Capa de la Superficie, que tiene en cuenta la interpolación horizontal [37] y el efecto de la rugosidad en la intensidad y dirección del viento. Estos valores también van a depender de la estabilidad del aire (neutral, estable o inestable) según la clasificación de Pasquill. Por encima de la Capa Superficial se realiza una interpolación lineal utilizando el viento geostrófico.

La modelización matemática de un perfil vertical de la velocidad del viento viene definido por,

$$\tilde{v}_0(z) = \frac{\tilde{v}^*}{k} \left(\log \frac{z}{z_0} - \Phi_m \right) \quad z_0 < z \leq z_{sl} \quad (2.66)$$

donde \tilde{v}_0 es la velocidad del viento, z es la altura por encima del terreno, \tilde{v}^* es

la velocidad de fricción, $k \simeq 0,4$ es la constante de von Karman, z_0 es la longitud de rugosidad y Φ_m es una función que depende de la estabilidad atmosférica, definida anteriormente.

Desde z_{sl} hasta z_{pbl} se realiza una interpolación lineal en $\rho(z)$ con el viento geostrófico \tilde{v}_g

$$\tilde{v}_0(z) = \rho(z) \tilde{v}_0(z_{sl}) + [1 - \rho(z)] \tilde{v}_g \quad \text{con} \quad z_{sl} < z \leq z_{pbl} \quad (2.67)$$

donde $\rho(z)$ es

$$\rho(z) = 1 - \left(\frac{z - z_{sl}}{z_{pbl} - z_{sl}} \right)^2 \left(3 - 2 \frac{z - z_{sl}}{z_{pbl} - z_{sl}} \right) \quad (2.68)$$

Finalmente, este modelo considera

$$\tilde{v}_0(z) = \tilde{v}_g \quad \text{si} \quad z > z_{pbl} \quad (2.69)$$

$$\tilde{v}_0(z) = 0 \quad \text{si} \quad z \leq z_0 \quad (2.70)$$

2.5. Esquemas en Diferencias Finitas

Según la ubicación en el cubo unitario, definido por el cambio a coordenadas conformes al terreno, cada nodo del dominio tiene un determinado esquema en diferencias finitas. Según su posición en el cubo (ver figura 2.6) los nodos se agrupan en doce categorías diferentes a las que se le asigna un número de referencia como sigue.

- Para los nodos interiores se asigna el número de referencia 0.
- Los nodos correspondientes al terreno tienen número de referencia 1.

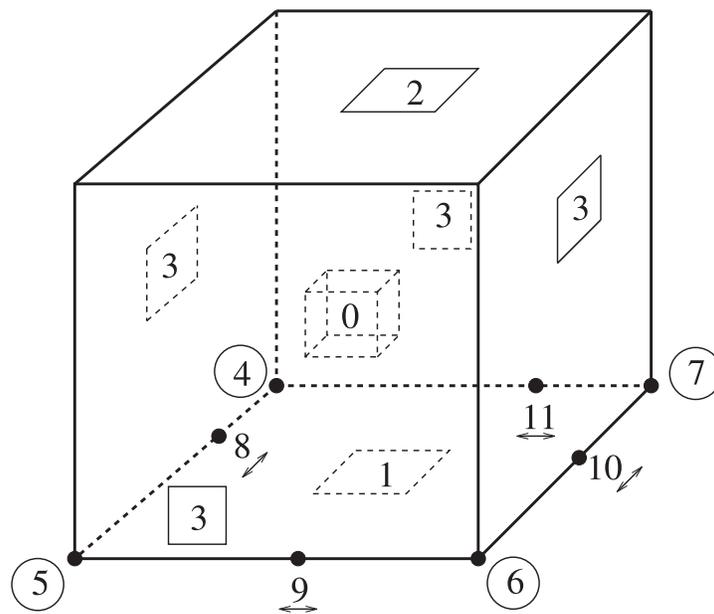


Figura 2.6: *Números de referencia en el cubo unitario*

- En la parte superior del dominio tenemos los nodos cuyo número de referencia es 2.
- A los nodos de las paredes laterales les corresponde el número de referencia 3.
- El nodo situado en el origen de coordenadas tiene número de referencia 4.
- Los nodos de coordenadas $(1, 0, 0)$, $(1, 1, 0)$ y $(0, 1, 0)$ se les asigna los números de referencia 5, 6 y 7 respectivamente.
- Los nodos de coordenadas nulas excepto en el eje x les corresponde el número de referencia 8 y análogamente, de coordenada no nula en el eje y se le asigna el número de referencia 11.
- Para los que cumplen la condición $x = 1, z = 0$ se les asigna el número de referencia 9 y finalmente los que cumplen la condición $y = 1, z = 0$ tienen número de referencia 10.

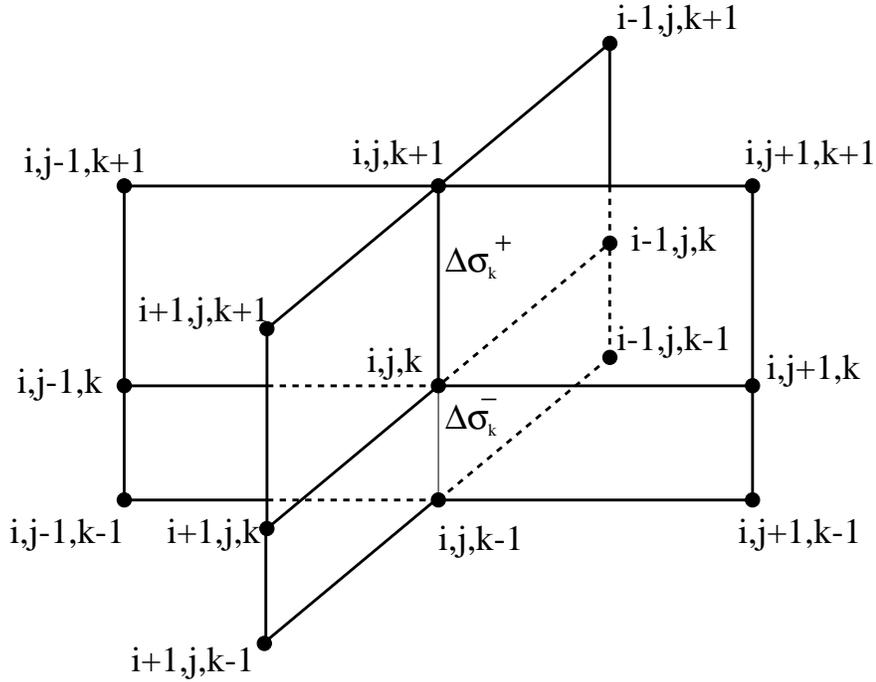


Figura 2.7: Molécula para los nodos interiores para la modelización de campos de viento

2.5.1. Nodos Internos

Para los esquemas en diferencias finitas de los nodos en el interior del dominio Ω cuyo número de referencia es cero, intervienen 15 puntos como se ilustra en la figura (2.7).

2.5.1.1. Derivadas Primeras

Los esquemas en diferencias finitas para $\frac{\partial\phi}{\partial\xi}$ son

$$\phi_{i+1,j,k} = \phi_{i,j,k} + \Delta\xi \frac{\partial\phi}{\partial\xi} + \frac{1}{2}\Delta\xi^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\xi^2} + \frac{1}{6}\Delta\xi^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\xi^3} \quad (2.71)$$

$$\phi_{i-1,j,k} = \phi_{i,j,k} - \Delta\xi \frac{\partial\phi}{\partial\xi} + \frac{1}{2}\Delta\xi^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\xi^2} - \frac{1}{6}\Delta\xi^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\xi^3} \quad (2.72)$$

Restando ambas ecuaciones, obtenemos

$$\frac{\partial \phi}{\partial \xi} = \frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{2\Delta \xi} - \frac{1}{6} \Delta \xi^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \xi^3} \quad (2.73)$$

Análogamente el esquema de $\frac{\partial \phi}{\partial \eta}$ sería

$$\phi_{i,j+1,k} = \phi_{i,j,k} + \Delta \eta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \frac{1}{2} \Delta \eta^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} + \frac{1}{6} \Delta \eta^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \eta^3} \quad (2.74)$$

$$\phi_{i,j-1,k} = \phi_{i,j,k} - \Delta \eta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \frac{1}{2} \Delta \eta^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} - \frac{1}{6} \Delta \eta^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \eta^3} \quad (2.75)$$

Restando ambas ecuaciones se tiene que

$$\frac{\partial \phi}{\partial \eta} = \frac{\phi_{i,j+1,k} - \phi_{i,j-1,k}}{2\Delta \eta} - \frac{1}{6} \Delta \eta^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \eta^3} \quad (2.76)$$

Tenemos en cuenta los siguientes desarrollos para obtener el esquema para $\frac{\partial \phi}{\partial \sigma}$

$$\phi_{i,j,k+1} = \phi_{i,j,k} + \Delta \sigma_k^+ \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} + \frac{1}{2} \Delta \sigma_k^{+2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} + \frac{1}{6} \Delta \sigma_k^{+3} \frac{\partial^3 \phi}{\partial \sigma^3} \quad (2.77)$$

$$\phi_{i,j,k-1} = \phi_{i,j,k} - \Delta \sigma_k^- \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} + \frac{1}{2} \Delta \sigma_k^{-2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} - \frac{1}{6} \Delta \sigma_k^{-3} \frac{\partial^3 \phi}{\partial \sigma^3} \quad (2.78)$$

Multiplicando la ecuación (2.77) por λ_k^2 , donde $\lambda_k = \frac{\Delta \sigma^-}{\Delta \sigma^+}$ y restando se obtiene,

$$\frac{\partial \phi}{\partial \sigma} = \frac{\lambda_k^2 \phi_{i,j,k+1} - (\lambda_k^2 - 1) \phi_{i,j,k} - \phi_{i,j,k-1}}{\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k^2 + \lambda_k)} - \frac{1}{6} \lambda_k \Delta \sigma_k^{+2} \frac{\partial^3 \phi}{\partial \sigma^3} \quad (2.79)$$

2.5.1.2. Derivadas Segundas

El esquema en diferencias finitas de $\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2}$ es

$$\phi_{i-1,j,k} = \phi_{i,j,k} - \Delta \xi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{1}{2} \Delta \xi^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} - \frac{1}{6} \Delta \xi^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \xi^3} + \frac{1}{24} \Delta \xi^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi^4} \quad (2.80)$$

$$\phi_{i+1,j,k} = \phi_{i,j,k} + \Delta \xi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{1}{2} \Delta \xi^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} + \frac{1}{6} \Delta \xi^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \xi^3} + \frac{1}{24} \Delta \xi^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi^4} \quad (2.81)$$

Sumando ambas ecuaciones se obtiene

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} = \frac{\phi_{i-1,j,k} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i+1,j,k}}{\Delta \xi^2} - \frac{1}{12} \Delta \xi^2 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi^4} \quad (2.82)$$

Análogamente obtenemos

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} = \frac{\phi_{i,j-1,k} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i,j+1,k}}{\Delta \eta^2} - \frac{1}{12} \Delta \eta^2 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \eta^4} \quad (2.83)$$

Desarrollamos las siguientes series para obtener el esquema en diferencias finitas de $\frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2}$,

$$\phi_{i,j,k-1} = \phi_{i,j,k} - \Delta \sigma_k^- \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} + \frac{1}{2} \Delta \sigma_k^{-2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} - \frac{1}{6} \Delta \sigma_k^{-3} \frac{\partial^3 \phi}{\partial \sigma^3} + \frac{1}{24} \Delta \sigma_k^{-4} \frac{\partial^4 \phi}{\partial \sigma^4} \quad (2.84)$$

$$\phi_{i,j,k+1} = \phi_{i,j,k} + \Delta \sigma_k^+ \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} + \frac{1}{2} \Delta \sigma_k^{+2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} + \frac{1}{6} \Delta \sigma_k^{+3} \frac{\partial^3 \phi}{\partial \sigma^3} + \frac{1}{24} \Delta \sigma_k^{+4} \frac{\partial^4 \phi}{\partial \sigma^4} \quad (2.85)$$

Multiplicando por $\Delta\sigma_k^+$ y $\Delta\sigma_k^-$ las ecuaciones (2.84) y (2.85) respectivamente, y sumando tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} &= 2 \frac{\phi_{i,j,k-1} - (1 + \lambda_k)\phi_{i,j,k} + \lambda_k \phi_{i,j,k+1}}{\Delta\sigma^{+2}(\lambda_k^2 + \lambda_k)} - \frac{1}{3}(\Delta\sigma_k^+ - \Delta\sigma_k^-) \frac{\partial^3 \phi}{\partial \sigma^3} \\ &\quad - \frac{1}{12}(\Delta\sigma_k^{+2} + \Delta\sigma_k^+ \Delta\sigma_k^- + \Delta\sigma_k^{-2}) \frac{\partial^4 \phi}{\partial \sigma^4} \end{aligned} \quad (2.86)$$

2.5.1.3. Derivadas Cruzadas

Los desarrollos para obtener el esquema de la derivada cruzada $\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta}$ son

$$\begin{aligned} \phi_{i+1,j+1,k} &= \phi_{i,j,k} + \Delta\xi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \Delta\eta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \frac{1}{2} \left[\Delta\xi^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} + 2\Delta\xi\Delta\eta \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} + \Delta\eta^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} \right] \\ &\quad + \frac{1}{6} \left[\Delta\xi^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \xi^3} + 3\Delta\xi^2\Delta\eta \frac{\partial^3 \phi}{\partial \xi^2 \partial \eta} + 3\Delta\xi\Delta\eta^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \xi \partial \eta^2} + \Delta\eta^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \eta^3} \right] \\ &\quad + \frac{1}{24} \left[\Delta\xi^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi^4} + 4\Delta\xi^3\Delta\eta \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi^3 \partial \eta} + 6\Delta\xi^2\Delta\eta^2 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi^2 \partial \eta^2} \right. \\ &\quad \left. + 4\Delta\xi\Delta\eta^3 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi \partial \eta^3} + \Delta\eta^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \eta^4} \right] \end{aligned} \quad (2.87)$$

$$\begin{aligned} \phi_{i-1,j+1,k} &= \phi_{i,j,k} - \Delta\xi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \Delta\eta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \frac{1}{2} \left[\Delta\xi^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} - 2\Delta\xi\Delta\eta \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} + \Delta\eta^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} \right] \\ &\quad + \frac{1}{6} \left[-\Delta\xi^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \xi^3} + 3\Delta\xi^2\Delta\eta \frac{\partial^3 \phi}{\partial \xi^2 \partial \eta} - 3\Delta\xi\Delta\eta^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \xi \partial \eta^2} + \Delta\eta^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \eta^3} \right] \\ &\quad + \frac{1}{24} \left[\Delta\xi^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi^4} - 4\Delta\xi^3\Delta\eta \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi^3 \partial \eta} + 6\Delta\xi^2\Delta\eta^2 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi^2 \partial \eta^2} \right. \\ &\quad \left. - 4\Delta\xi\Delta\eta^3 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi \partial \eta^3} + \Delta\eta^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \eta^4} \right] \end{aligned} \quad (2.88)$$

$$\begin{aligned}
\phi_{i+1,j-1,k} = & \phi_{i,j,k} + \Delta\xi \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \Delta\eta \frac{\partial\phi}{\partial\eta} + \frac{1}{2} \left[\Delta\xi^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\xi^2} - 2\Delta\xi\Delta\eta \frac{\partial^2\phi}{\partial\xi\partial\eta} + \Delta\eta^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\eta^2} \right] \\
& + \frac{1}{6} \left[\Delta\xi^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\xi^3} - 3\Delta\xi^2\Delta\eta \frac{\partial^3\phi}{\partial\xi^2\partial\eta} + 3\Delta\xi\Delta\eta^2 \frac{\partial^3\phi}{\partial\xi\partial\eta^2} - \Delta\eta^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta^3} \right] \\
& + \frac{1}{24} \left[\Delta\xi^4 \frac{\partial^4\phi}{\partial\xi^4} - 4\Delta\xi^3\Delta\eta \frac{\partial^4\phi}{\partial\xi^3\partial\eta} + 6\Delta\xi^2\Delta\eta^2 \frac{\partial^4\phi}{\partial\xi^2\partial\eta^2} \right. \\
& \left. - 4\Delta\xi\Delta\eta^3 \frac{\partial^4\phi}{\partial\xi\partial\eta^3} + \Delta\eta^4 \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta^4} \right] \tag{2.89}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\phi_{i-1,j-1,k} = & \phi_{i,j,k} - \Delta\xi \frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \Delta\eta \frac{\partial\phi}{\partial\eta} + \frac{1}{2} \left[\Delta\xi^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\xi^2} + 2\Delta\xi\Delta\eta \frac{\partial^2\phi}{\partial\xi\partial\eta} + \Delta\eta^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\eta^2} \right] \\
& + \frac{1}{6} \left[-\Delta\xi^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\xi^3} - 3\Delta\xi^2\Delta\eta \frac{\partial^3\phi}{\partial\xi^2\partial\eta} - 3\Delta\xi\Delta\eta^2 \frac{\partial^3\phi}{\partial\xi\partial\eta^2} - \Delta\eta^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta^3} \right] \\
& + \frac{1}{24} \left[\Delta\xi^4 \frac{\partial^4\phi}{\partial\xi^4} + 4\Delta\xi^3\Delta\eta \frac{\partial^4\phi}{\partial\xi^3\partial\eta} + 6\Delta\xi^2\Delta\eta^2 \frac{\partial^4\phi}{\partial\xi^2\partial\eta^2} \right. \\
& \left. + 4\Delta\xi\Delta\eta^3 \frac{\partial^4\phi}{\partial\xi\partial\eta^3} + \Delta\eta^4 \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta^4} \right] \tag{2.90}
\end{aligned}$$

Buscaremos una combinación lineal de los valores de la función ϕ en los distintos puntos de la molécula, para obtener el esquema de dicha derivada cruzada.

De esta forma si multiplicamos por A , B , C y D (valores arbitrarios) las ecuaciones (2.87), (2.88), (2.89) y (2.90) respectivamente, obtenemos el siguiente sistema, de tal manera que se eliminen los términos convenientes (todas las derivadas parciales, excepto las derivadas cruzadas de orden dos),

$$A - B + C - D = 0$$

$$A + B - C - D = 0$$

$$A + B + C + D = 0$$

la solución de este sistema es

$$B = -A$$

$$C = -A$$

$$D = A$$

resultando el esquema

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} &= \frac{\phi_{i+1,j+1,k} - \phi_{i-1,j+1,k} - \phi_{i+1,j-1,k} + \phi_{i-1,j-1,k}}{4\Delta\xi\Delta\eta} \\ &\quad - \frac{1}{6}\Delta\xi^2 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi^3 \partial \eta} - \frac{1}{6}\Delta\eta^2 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi \partial \eta^3} \end{aligned} \quad (2.91)$$

Análogamente realizamos los siguientes desarrollos en serie para hallar la derivada cruzada $\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta \partial \sigma}$,

$$\begin{aligned} \phi_{i,j+1,k+1} &= \phi_{i,j,k} + \Delta\eta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \Delta\sigma_k^+ \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} + \frac{1}{2} \left[\Delta\eta^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} + 2\Delta\eta\Delta\sigma_k^+ \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta \partial \sigma} + \Delta\sigma_k^{+2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} \right] \\ &\quad + \frac{1}{6} \left[\Delta\eta^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \eta^3} + 3\Delta\eta^2\Delta\sigma_k^+ \frac{\partial^3 \phi}{\partial \eta^2 \partial \sigma} + 3\Delta\eta\Delta\sigma_k^{+2} \frac{\partial^3 \phi}{\partial \eta \partial \sigma^2} + \Delta\sigma_k^{+3} \frac{\partial^3 \phi}{\partial \sigma^3} \right] \\ &\quad + \frac{1}{24} \left[\Delta\eta^4 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \eta^4} + 4\Delta\eta^3\Delta\sigma_k^+ \frac{\partial^4 \phi}{\partial \eta^3 \partial \sigma} + 6\Delta\eta^2\Delta\sigma_k^{+2} \frac{\partial^4 \phi}{\partial \eta^2 \partial \sigma^2} \right. \\ &\quad \left. + 4\Delta\eta\Delta\sigma_k^{+3} \frac{\partial^4 \phi}{\partial \eta \partial \sigma^3} + \Delta\sigma_k^{+4} \frac{\partial^4 \phi}{\partial \sigma^4} \right] \end{aligned} \quad (2.92)$$

$$\begin{aligned}
\phi_{i,j-1,k+1} = & \phi_{i,j,k} - \Delta\eta \frac{\partial\phi}{\partial\eta} + \Delta\sigma_k^+ \frac{\partial\phi}{\partial\sigma} + \frac{1}{2} \left[\Delta\eta^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\eta^2} - 2\Delta\eta\Delta\sigma_k^+ \frac{\partial^2\phi}{\partial\eta\partial\sigma} + \Delta\sigma_k^{+2} \frac{\partial^2\phi}{\partial\sigma^2} \right] \\
& + \frac{1}{6} \left[-\Delta\eta^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta^3} + 3\Delta\eta^2\Delta\sigma_k^+ \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta^2\partial\sigma} - 3\Delta\eta\Delta\sigma_k^{+2} \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta\partial\sigma^2} + \Delta\sigma_k^{+3} \frac{\partial^3\phi}{\partial\sigma^3} \right] \\
& + \frac{1}{24} \left[\Delta\eta^4 \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta^4} - 4\Delta\eta^3\Delta\sigma_k^- \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta^3\partial\sigma} + 6\Delta\eta^2\Delta\sigma_k^{-2} \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta^2\partial\sigma^2} \right. \\
& \left. - 4\Delta\eta\Delta\sigma_k^{-3} \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta\partial\sigma^3} + \Delta\sigma_k^{+4} \frac{\partial^4\phi}{\partial\sigma^4} \right] \tag{2.93}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\phi_{i,j+1,k-1} = & \phi_{i,j,k} + \Delta\eta \frac{\partial\phi}{\partial\eta} - \Delta\sigma_k^- \frac{\partial\phi}{\partial\sigma} + \frac{1}{2} \left[\Delta\eta^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\eta^2} - 2\Delta\eta\Delta\sigma_k^- \frac{\partial^2\phi}{\partial\eta\partial\sigma} + \Delta\sigma_k^{-2} \frac{\partial^2\phi}{\partial\sigma^2} \right] \\
& + \frac{1}{6} \left[\Delta\eta^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta^3} - 3\Delta\eta^2\Delta\sigma_k^- \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta^2\partial\sigma} + 3\Delta\eta\Delta\sigma_k^{-2} \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta\partial\sigma^2} - \Delta\sigma_k^{-3} \frac{\partial^3\phi}{\partial\sigma^3} \right] \\
& + \frac{1}{24} \left[\Delta\eta^4 \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta^4} - 4\Delta\eta^3\Delta\sigma_k^- \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta^3\partial\sigma} + 6\Delta\eta^2\Delta\sigma_k^{-2} \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta^2\partial\sigma^2} \right. \\
& \left. - 4\Delta\eta\Delta\sigma_k^{-3} \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta\partial\sigma^3} + \Delta\sigma_k^{-4} \frac{\partial^4\phi}{\partial\sigma^4} \right] \tag{2.94}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\phi_{i,j-1,k-1} = & \phi_{i,j,k} - \Delta\eta \frac{\partial\phi}{\partial\eta} - \Delta\sigma_k^- \frac{\partial\phi}{\partial\sigma} + \frac{1}{2} \left[\Delta\eta^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\eta^2} + 2\Delta\eta\Delta\sigma_k^- \frac{\partial^2\phi}{\partial\eta\partial\sigma} + \Delta\sigma_k^{-2} \frac{\partial^2\phi}{\partial\sigma^2} \right] \\
& + \frac{1}{6} \left[-\Delta\eta^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta^3} - 3\Delta\eta^2\Delta\sigma_k^- \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta^2\partial\sigma} - 3\Delta\eta\Delta\sigma_k^{-2} \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta\partial\sigma^2} - \Delta\sigma_k^{-3} \frac{\partial^3\phi}{\partial\sigma^3} \right] \\
& + \frac{1}{24} \left[\Delta\eta^4 \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta^4} + 4\Delta\eta^3\Delta\sigma_k^- \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta^3\partial\sigma} + 6\Delta\eta^2\Delta\sigma_k^{-2} \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta^2\partial\sigma^2} \right. \\
& \left. + 4\Delta\eta\Delta\sigma_k^{-3} \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta\partial\sigma^3} + \Delta\sigma_k^{-4} \frac{\partial^4\phi}{\partial\sigma^4} \right] \tag{2.95}
\end{aligned}$$

$$\phi_{i,j,k+1} = \phi_{i,j,k} + \Delta\sigma_k^+ \frac{\partial\phi}{\partial\sigma} + \frac{1}{2}\Delta\sigma_k^{+2} \frac{\partial^2\phi}{\partial\sigma^2} + \frac{1}{6}\Delta\sigma_k^{+3} \frac{\partial^3\phi}{\partial\sigma^3} + \frac{1}{24}\Delta\sigma_k^{+4} \frac{\partial^4\phi}{\partial\sigma^4} \quad (2.96)$$

$$\phi_{i,j,k-1} = \phi_{i,j,k} - \Delta\sigma_k^- \frac{\partial\phi}{\partial\sigma} + \frac{1}{2}\Delta\sigma_k^{-2} \frac{\partial^2\phi}{\partial\sigma^2} - \frac{1}{6}\Delta\sigma_k^{-3} \frac{\partial^3\phi}{\partial\sigma^3} + \frac{1}{24}\Delta\sigma_k^{-4} \frac{\partial^4\phi}{\partial\sigma^4} \quad (2.97)$$

$$\phi_{i,j-1,k} = \phi_{i,j,k} - \Delta\eta \frac{\partial\phi}{\partial\eta} + \frac{1}{2}\Delta\eta^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\eta^2} - \frac{1}{6}\Delta\eta^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta^3} + \frac{1}{24}\Delta\eta^4 \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta^4} \quad (2.98)$$

$$\phi_{i,j+1,k} = \phi_{i,j,k} + \Delta\eta \frac{\partial\phi}{\partial\eta} + \frac{1}{2}\Delta\eta^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\eta^2} + \frac{1}{6}\Delta\eta^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta^3} + \frac{1}{24}\Delta\eta^4 \frac{\partial^4\phi}{\partial\eta^4} \quad (2.99)$$

Como en el caso anterior, buscamos la combinación lineal y multiplicamos por A, B, C, D, E, F, G y H las ecuaciones anteriores, e igualando a cero los términos que nos interesan, se obtiene el siguiente sistema

$$\begin{aligned} A - B + C - D - G + H &= 0 \\ A + B - \lambda_k C - \lambda_k D + E - \lambda_k F &= 0 \\ A + B + C + D + G + H &= 0 \\ A + B + \lambda_k^2 C + \lambda_k^2 D + E + \lambda_k^2 F &= 0 \\ A + B - \lambda_k C - \lambda_k D &= 0 \\ A - B + \lambda_k^2 C - \lambda_k^2 D &= 0 \\ A + B - \lambda_k^3 C - \lambda_k^3 D + E - \lambda_k^3 F &= 0 \end{aligned}$$

donde la solución es

$$\begin{aligned}
 A &= \lambda_k^2 D \\
 B &= -\lambda_k^2 D \\
 C &= -D \\
 D &= D \\
 E &= 0 \\
 F &= 0 \\
 G &= D(\lambda_k^2 - 1) \\
 H &= -D(\lambda_k^2 - 1)
 \end{aligned}$$

obteniendo el siguiente esquema en diferencias finitas

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta \partial \sigma} &= \frac{\lambda_k^2 \phi_{i,j+1,k+1} - \lambda_k^2 \phi_{i,j-1,k+1} - \phi_{i,j+1,k-1} + \phi_{i,j-1,k-1} + (\lambda_k^2 - 1) \phi_{i,j-1,k}}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k^2 + \lambda_k) \Delta\eta} \\
 &\quad - \frac{(\lambda_k^2 - 1) \phi_{i,j+1,k}}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k^2 + \lambda_k) \Delta\eta} - \frac{1}{6} \Delta\eta^2 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \eta^3 \partial \sigma} - \frac{1}{6} \Delta\sigma^- \Delta\sigma^+ \frac{\partial^4 \phi}{\partial \eta \partial \sigma^3} \quad (2.100)
 \end{aligned}$$

De manera análoga se tiene el esquema para $\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \sigma}$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \sigma} &= \frac{\lambda_k^2 \phi_{i+1,j,k+1} - \lambda_k^2 \phi_{i-1,j,k+1} - \phi_{i+1,j,k-1} + \phi_{i-1,j,k-1} + (\lambda_k^2 - 1) \phi_{i-1,j,k}}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k^2 + \lambda_k) \Delta\xi} \\
 &\quad - \frac{(\lambda_k^2 - 1) \phi_{i+1,j,k}}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k^2 + \lambda_k) \Delta\xi} - \frac{1}{6} \Delta\xi^2 \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi^3 \partial \sigma} - \frac{1}{6} \Delta\sigma^- \Delta\sigma^+ \frac{\partial^4 \phi}{\partial \xi \partial \sigma^3} \quad (2.101)
 \end{aligned}$$

En resumen, para los puntos interiores, donde el número de referencia es 0, los esquemas propuestos para las derivadas de $\phi(x_{1i}, x_{2j}, x_{3k}, t)$ son

$$\frac{\partial \phi}{\partial \xi} = \frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{2\Delta\xi} + O(\Delta\xi^2) \quad (2.102)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \eta} = \frac{\phi_{i,j+1,k} - \phi_{i,j-1,k}}{2\Delta\eta} + O(\Delta\eta^2) \quad (2.103)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \sigma} = \frac{\lambda_k^2 \phi_{i,j,k+1} - (\lambda_k^2 - 1)\phi_{i,j,k} - \phi_{i,j,k-1}}{\Delta\sigma_k^+(\lambda_k + \lambda_k^2)} + O(\lambda_k \Delta\sigma_k^{+2}) \quad (2.104)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} = \frac{\phi_{i-1,j,k} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i+1,j,k}}{\Delta\xi^2} + O(\Delta\xi^2) \quad (2.105)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} = \frac{\phi_{i,j-1,k} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i,j+1,k}}{\Delta\eta^2} + O(\Delta\eta^2) \quad (2.106)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2} &= 2 \frac{\phi_{i,j,k-1} - (1 + \lambda_k)\phi_{i,j,k} + \lambda_k \phi_{i,j,k+1}}{\Delta\sigma_k^+(\lambda_k + \lambda_k^2)} - \frac{1}{3}(\Delta\sigma_k^+ - \Delta\sigma_k^-) \\ &\quad \frac{\partial^3 \phi}{\partial \sigma^3} + O(\Delta\sigma_k^{+2} - \Delta\sigma_k^- \Delta\sigma_k^+ + \Delta\sigma_k^{-2}) \end{aligned} \quad (2.107)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} = \frac{\phi_{i+1,j+1,k} - \phi_{i-1,j+1,k} - \phi_{i+1,j-1,k} + \phi_{i-1,j-1,k}}{4\Delta\xi\Delta\eta} + O(\Delta\xi^2, \Delta\eta^2) \quad (2.108)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \sigma} &= \frac{\lambda_k^2 \phi_{i+1,j,k+1} - \lambda_k^2 \phi_{i-1,j,k+1} - \phi_{i+1,j,k-1} + \phi_{i-1,j,k-1}}{2\Delta\sigma_k^+(\lambda_k + \lambda_k^2)\Delta\xi} \\ &\quad + \frac{(\lambda_k^2 - 1)\phi_{i-1,j,k} - (\lambda_k^2 - 1)\phi_{i+1,j,k}}{2\Delta\sigma_k^+(\lambda_k + \lambda_k^2)\Delta\xi} + O(\Delta\xi^2, \lambda_k \Delta\sigma_k^{+2}) \end{aligned} \quad (2.109)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta \partial \sigma} = & \frac{\lambda_k^2 \phi_{i,j+1,k+1} - \lambda_k^2 \phi_{i,j-1,k+1} - \phi_{i,j+1,k-1} + \phi_{i,j-1,k-1}}{2\Delta\sigma_k^+(\lambda_k + \lambda_k^2)\Delta\eta} \\ & + \frac{(\lambda_k^2 - 1)\phi_{i,j-1,k} - (\lambda_k^2 - 1)\phi_{i,j+1,k}}{2\Delta\sigma_k^+(\lambda_k + \lambda_k^2)\Delta\eta} + O(\Delta\eta^2, \Delta\sigma_k^- \Delta\sigma_k^+) \end{aligned} \quad (2.110)$$

siendo $\lambda_k = \frac{\Delta\sigma_k^-}{\Delta\sigma_k^+}$.

Todos los esquemas son de segundo orden, excepto el de la $\frac{\partial^2 \phi}{\partial \sigma^2}$, que solo lo es en el caso de mallado regular ($\Delta\sigma_k^+ = \Delta\sigma_k^-$), o si se define de tal forma que

$$\Delta\sigma_k^+ = \Delta\sigma_k^- \Delta\sigma_{k0} \quad (2.111)$$

$$\Delta\sigma_k^+ = (\Delta\sigma_k^-)^2 \Delta\sigma_{k0} \quad (2.112)$$

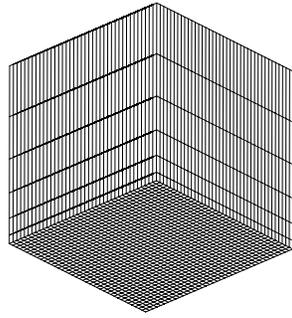
$$\Delta\sigma_k^+ = (\Delta\sigma_k^-)^3 \Delta\sigma_{k0} \quad (2.113)$$

$$\Delta\sigma_k^+ = \Delta\sigma_k^- + \Delta\sigma_{k0}^2 \quad (2.114)$$

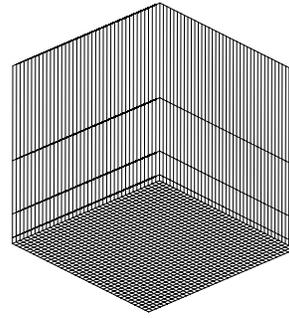
$$\Delta\sigma_k^+ = \Delta\sigma_k^- + \Delta\sigma_k^- \Delta\sigma_{k0} \quad (2.115)$$

$$\Delta\sigma_k^+ = \Delta\sigma_k^- + \Delta\sigma_k^{-2} \quad (2.116)$$

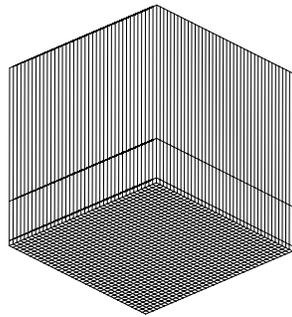
Las expresiones (2.111), (2.112) (2.113) (2.114) y (2.115) definen el espaciado vertical de tal forma que las coordenadas σ de los nodos vienen definidas de manera lineal, cuadrática, cúbica, en progresión aritmética y en progresión geométrica, respectivamente. La expresión (2.116) produce un espaciado vertical aún más concentrado en la zona inferior. En la figura (2.8) podemos ver un ejemplo de los diferentes tipos de espaciado vertical.



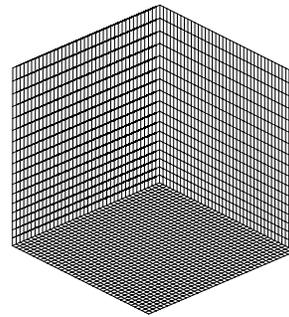
(a) Lineal



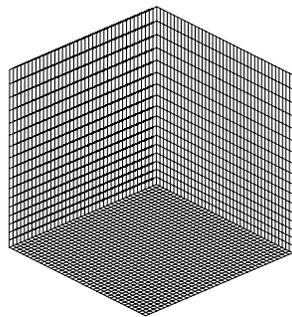
(b) Cuadrática



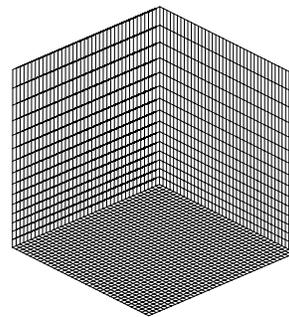
(c) Cúbica



(d) Progresión aritmética



(e) Progresión geométrica

(f) $\Delta\sigma_k^+ = \Delta\sigma_k^- + \Delta\sigma_k^{-2}$ **Figura 2.8:** *Mallas con espaciados verticales variables*

2.5.2. Nodos del Contorno

2.5.2.1. Nodos Situados en la Frontera Superior

Tenemos los siguientes esquemas en diferencias finitas

$$\phi_{i,j,k-1} = \phi_{i,j,k} - \Delta\sigma_k^- \frac{\partial\phi}{\partial\sigma} + \frac{1}{2}\Delta\sigma_k^{-2} \frac{\partial^2\phi}{\partial\sigma^2} - \frac{1}{6}\Delta\sigma_k^{-3} \frac{\partial^3\phi}{\partial\sigma^3} \quad (2.117)$$

$$\begin{aligned} \phi_{i,j,k-2} &= \phi_{i,j,k} - (\Delta\sigma_k^- + \Delta\sigma_k^{--}) \frac{\partial\phi}{\partial\sigma} + \frac{1}{2}(\Delta\sigma_k^- + \Delta\sigma_k^{--})^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\sigma^2} \\ &\quad - \frac{1}{6}(\Delta\sigma_k^- + \Delta\sigma_k^{--})^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\sigma^3} \end{aligned} \quad (2.118)$$

Multiplicando la ecuación (2.117) por $(\Delta\sigma_k^- + \Delta\sigma_k^{--})^2$, y la ecuación (2.118) por $\Delta\sigma_k^{-2}$, y restándolas tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial\phi}{\partial\sigma} &= \frac{(2 + \lambda_{k-1})}{\Delta\sigma_k^- (1 + \lambda_{k-1})} \phi_{i,j,k} - \frac{(1 + \lambda_{k-1})}{\Delta\sigma_k^- \lambda_{k-1}} \phi_{i,j,k-1} + \frac{1}{\Delta\sigma_k^- (\lambda_{k-1} + \lambda_{k-1}^2)} \phi_{i,j,k-2} \\ &\quad + \frac{1}{6} \Delta\sigma_k^- (\Delta\sigma_k^- + \Delta\sigma_k^{--}) \frac{\partial^3\phi}{\partial\sigma^3} \end{aligned} \quad (2.119)$$

donde $\lambda_{k-1} = \frac{\Delta\sigma_k^{--}}{\Delta\sigma_k^-}$

2.5.2.2. Nodos del Terreno

Los esquemas en diferencias finitas son

$$\begin{aligned} \phi_{i,j,k+1} &= \phi_{i,j,k} + \Delta\sigma_k^+ \frac{\partial\phi}{\partial\sigma} + \frac{1}{2}\Delta\sigma_k^{+2} \frac{\partial^2\phi}{\partial\sigma^2} + \frac{1}{6}\Delta\sigma_k^{+3} \frac{\partial^3\phi}{\partial\sigma^3} \\ &\quad + \frac{1}{24}\Delta\sigma_k^{+3} \frac{\partial^3\phi}{\partial\sigma^3} \end{aligned} \quad (2.120)$$

$$\begin{aligned} \phi_{i,j,k+2} &= \phi_{i,j,k} + (\Delta\sigma_k^+ + \Delta\sigma_k^{++}) \frac{\partial\phi}{\partial\sigma} + \frac{1}{2}(\Delta\sigma_k^+ + \Delta\sigma_k^{++})^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\sigma^2} \\ &\quad + \frac{1}{6}(\Delta\sigma_k^+ + \Delta\sigma_k^{++})^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\sigma^3} \end{aligned} \quad (2.121)$$

Multiplicando la ecuación (2.120) por $(\Delta\sigma_k^+ + \Delta\sigma_k^{++})^2$ y la ecuación (2.121) por $\Delta\sigma_k^{+2}$, y restándolas, obtenemos el esquema

$$\begin{aligned} \frac{\partial\phi}{\partial\sigma} = & \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1} + 1)} \phi_{i,j,k} - \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1} + 1)} \phi_{i,j,k+2} \\ & + \frac{1}{6} \Delta\sigma_k^+ (\Delta\sigma_k^+ + \Delta\sigma_k^{++}) \frac{\partial^3\phi}{\partial\sigma^3} \end{aligned} \quad (2.122)$$

donde $\lambda_{k+1} = \frac{\Delta\sigma_k^+}{\Delta\sigma_k^{++}}$

2.5.2.3. Resto de Nodos del Contorno

Para $\frac{\partial\phi}{\partial\xi}(\phi_{i,j,k}, \phi_{i+1,j,k}, \phi_{i+2,j,k})$ tenemos los siguientes esquemas en diferencias finitas

$$\phi_{i+1,j,k} = \phi_{i,j,k} + \Delta\xi \frac{\partial\phi}{\partial\xi} + \frac{1}{2} \Delta\xi^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\xi^2} + \frac{1}{6} \Delta\xi^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\xi^3} \quad (2.123)$$

$$\phi_{i+2,j,k} = \phi_{i,j,k} + 2\Delta\xi \frac{\partial\phi}{\partial\xi} + 2\Delta\xi^2 \frac{\partial^2\phi}{\partial\xi^2} + \frac{4}{3} \Delta\xi^3 \frac{\partial^3\phi}{\partial\xi^3} \quad (2.124)$$

multiplicando la ecuación (2.123) por 4, y restando con la ecuación (2.124)

$$\frac{\partial\phi}{\partial\xi} = \frac{4\phi_{i+1,j,k} - 3\phi_{i,j,k} - \phi_{i+2,j,k}}{2\Delta\xi} + \frac{1}{3} \Delta\xi^2 \frac{\partial^3\phi}{\partial\xi^3} \quad (2.125)$$

Análogamente tenemos $\frac{\partial\phi}{\partial\eta}(\phi_{i,j,k}, \phi_{i,j+1,k}, \phi_{i,j+2,k})$

$$\frac{\partial\phi}{\partial\eta} = \frac{4\phi_{i,j+1,k} - 3\phi_{i,j,k} - \phi_{i,j+2,k}}{2\Delta\eta} + \frac{1}{3} \Delta\eta^2 \frac{\partial^3\phi}{\partial\eta^3} \quad (2.126)$$

Para $\frac{\partial \phi}{\partial \xi}(\phi_{i-2,j,k}, \phi_{i-1,j,k}, \phi_{i,j,k})$ los esquemas son los siguientes

$$\phi_{i-1,j,k} = \phi_{i,j,k} - \Delta \xi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{1}{2} \Delta \xi^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} - \frac{1}{6} \Delta \xi^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \xi^3} \quad (2.127)$$

$$\phi_{i-2,j,k} = \phi_{i,j,k} - 2\Delta \xi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + 2\Delta \xi^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} - \frac{4}{3} \Delta \xi^3 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \xi^3} \quad (2.128)$$

al multiplicar la ecuación (2.127) por 4 y restándola con la ecuación (2.128) tenemos

$$\frac{\partial \phi}{\partial \xi} = \frac{\phi_{i-2,j,k} + 3\phi_{i,j,k} - 4\phi_{i-1,j,k}}{2\Delta \xi} + \frac{1}{3} \Delta \xi^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \xi^3} \quad (2.129)$$

Y de forma similar obtenemos para $\frac{\partial \phi}{\partial \eta}(\phi_{i,j-2,k}, \phi_{i,j-1,k}, \phi_{i,j,k})$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \eta} = \frac{\phi_{i,j-2,k} + 3\phi_{i,j,k} - 4\phi_{i,j-1,k}}{2\Delta \eta} + \frac{1}{3} \Delta \eta^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial \eta^3} \quad (2.130)$$

Las primeras derivadas de ϕ , se muestran en las tablas (2.2) y (2.3) según su número de referencia ya mostrado en la figura (2.6).

NR	$\frac{\partial \phi}{\partial \xi}$	$\frac{\partial \phi}{\partial \eta}$	$\frac{\partial \phi}{\partial \sigma}$
<p>1</p>	$\frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{2\Delta\xi}$	$\frac{\phi_{i,j+1,k} - \phi_{i,j-1,k}}{2\Delta\eta}$	$\frac{\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - \frac{2\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k} - \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k+2}$
<p>2</p>	$\frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{2\Delta\xi}$	$\frac{\phi_{i,j+1,k} - \phi_{i,j-1,k}}{2\Delta\eta}$	$\frac{1}{\Delta\sigma^- \lambda_{k-1} + \Delta\sigma^- (\lambda_{k-1})^2} \phi_{i,j,k-2} + \frac{(2+\lambda_{k-1})}{\Delta\sigma^- (1+\lambda_{k-1})} \phi_{i,j,k} - \frac{(1+\lambda_{k-1})}{\Delta\sigma^- \lambda_{k-1}} \phi_{i,j,k-1}$
<p>4</p>	$\frac{4\phi_{i+1,j,k} - 3\phi_{i,j,k} - \phi_{i+2,j,k}}{2\Delta\xi}$	$\frac{4\phi_{i,j+1,k} - 3\phi_{i,j,k} - \phi_{i,j+2,k}}{2\Delta\eta}$	$\frac{\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - \frac{2\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k} - \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k+2}$
<p>5</p>	$\frac{\phi_{i-2,j,k} + 3\phi_{i,j,k} - 4\phi_{i-1,j,k}}{2\Delta\xi}$	$\frac{4\phi_{i,j+1,k} - 3\phi_{i,j,k} - \phi_{i,j+2,k}}{2\Delta\eta}$	$\frac{\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - \frac{2\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k} - \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k+2}$
<p>6</p>	$\frac{\phi_{i-2,j,k} + 3\phi_{i,j,k} - 4\phi_{i-1,j,k}}{2\Delta\xi}$	$\frac{\phi_{i,j-2,k} + 3\phi_{i,j,k} - 4\phi_{i,j-1,k}}{2\Delta\eta}$	$\frac{\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - \frac{2\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k} - \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k+2}$

Tabla 2.2: Esquemas en diferencias finitas de las derivadas primeras de ϕ que intervienen en las condiciones de contorno, los números de referencia son: 1, 2, 4, 5 y 6.

NR	$\frac{\partial \phi}{\partial \xi}$	$\frac{\partial \phi}{\partial \eta}$	$\frac{\partial \phi}{\partial \sigma}$
<p>7</p>	$\frac{4\phi_{i+1,j,k} - 3\phi_{i,j,k} - \phi_{i+2,j,k}}{2\Delta\xi}$	$\frac{\phi_{i,j-2,k} + 3\phi_{i,j,k} - 4\phi_{i,j-1,k}}{2\Delta\eta}$	$\frac{\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - \frac{2\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k} - \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k+2}$
<p>8</p>	$\frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{2\Delta\xi}$	$\frac{4\phi_{i,j+1,k} - 3\phi_{i,j,k} - \phi_{i,j+2,k}}{2\Delta\eta}$	$\frac{\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - \frac{2\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k} - \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k+2}$
<p>9</p>	$\frac{\phi_{i-2,j,k} + 3\phi_{i,j,k} - 4\phi_{i-1,j,k}}{2\Delta\xi}$	$\frac{\phi_{i,j+1,k} - \phi_{i,j-1,k}}{2\Delta\eta}$	$\frac{\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - \frac{2\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k} - \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k+2}$
<p>10</p>	$\frac{\phi_{i+1,j,k} - \phi_{i-1,j,k}}{2\Delta\xi}$	$\frac{\phi_{i,j-2,k} + 3\phi_{i,j,k} - 4\phi_{i,j-1,k}}{2\Delta\eta}$	$\frac{\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - \frac{2\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k} - \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k+2}$
<p>11</p>	$\frac{4\phi_{i+1,j,k} - 3\phi_{i,j,k} - \phi_{i+2,j,k}}{2\Delta\xi}$	$\frac{\phi_{i,j+1,k} - \phi_{i,j-1,k}}{2\Delta\eta}$	$\frac{\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - \frac{2\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k} - \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \phi_{i,j,k+2}$

Tabla 2.3: Esquemas en diferencias finitas de las derivadas primeras de ϕ que intervienen en las condiciones de contorno, los números de referencia van del 7 al 11.

2.5.3. Esquemas de las Derivadas de la Función que Define la Topografía del Terreno

Los esquemas en diferencias finitas para las derivadas de la función z_s , que define la topografía del terreno se realizan de manera análoga a los esquemas obtenidos en la sección anterior. Estos esquemas se realizan para cada número de referencia como se muestran en la tabla (2.4)

Esquemas para las derivadas de z_s		
NR	$\frac{\partial z_s}{\partial x}$	$\frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2}$
1, 8, 10	$\frac{z_{s_{i+1,j}} - z_{s_{i-1,j}}}{2\Delta x}$	$\frac{z_{s_{i+1,j}} - 2z_{s_{i,j}} + z_{s_{i-1,j}}}{\Delta x^2}$
4, 7, 11	$\frac{4z_{s_{i+1,j}} - 3z_{s_{i,j}} - z_{s_{i+2,j}}}{2\Delta x}$	$\frac{2z_{s_{i,j}} - z_{s_{i+3,j}} + 4z_{s_{i+2,j}} - 5z_{s_{i+1,j}}}{\Delta x^2}$
5, 6, 9	$\frac{z_{s_{i-2,j}} + 3z_{s_{i,j}} - 4z_{s_{i-1,j}}}{2\Delta x}$	$\frac{2z_{s_{i,j}} - z_{s_{i-3,j}} + 4z_{s_{i-2,j}} - 5z_{s_{i-1,j}}}{\Delta x^2}$
NR	$\frac{\partial z_s}{\partial y}$	$\frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2}$
1, 9, 11	$\frac{z_{s_{i,j+1}} - z_{s_{i,j-1}}}{2\Delta y}$	$\frac{z_{s_{i,j+1}} - 2z_{s_{i,j}} + z_{s_{i,j-1}}}{\Delta y^2}$
4, 5, 8	$\frac{4z_{s_{i,j+1}} - 3z_{s_{i,j}} - z_{s_{i,j+2}}}{2\Delta y}$	$\frac{2z_{s_{i,j}} - z_{s_{i,j+3}} + 4z_{s_{i,j+2}} - 5z_{s_{i,j+1}}}{\Delta y^2}$
6, 7, 10	$\frac{z_{s_{i,j-2}} + 3z_{s_{i,j}} - 4z_{s_{i,j-1}}}{2\Delta y}$	$\frac{2z_{s_{i,j}} - z_{s_{i,j-3}} + 4z_{s_{i,j-2}} - 5z_{s_{i,j-1}}}{\Delta y^2}$

Tabla 2.4: Esquemas para las derivadas de la función que define la topografía del terreno

2.6. Construcción del Sistema de Ecuaciones

Lineales

Al reemplazar todos los esquemas obtenidos de diferencias finitas con el cambio de variable en la ecuación (2.43), y agrupando convenientemente por nodos obtenemos las ecuaciones correspondientes a nuestro sistema $Ax = b$.

Según la ubicación de los nodos se tiene un esquema como ya se ha mostrado en la tabla (2.2) y (2.3).

2.6.1. Ecuaciones Correspondientes a los Nodos de Número de Referencia 0

Al sustituir todos los esquemas en diferencias finitas obtenidos en la sección anterior, en la ecuación (2.43) tenemos

$$\begin{aligned}
& \frac{\pi}{x_l^2} \left(\frac{\phi_{i-1,j,k} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i+1,j,k}}{\Delta\xi^2} \right) + \frac{\pi}{y_l^2} \left(\frac{\phi_{i,j-1,k} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i,j+1,k}}{\Delta\eta^2} \right) \\
& + \left[\frac{(\sigma-1)^2}{\pi} \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) + \frac{T_v}{T_h} \frac{1}{\pi} \right] \left(\frac{2\phi_{i,j,k-1} - (\lambda_k+1)\phi_{i,j,k} + \lambda_k\phi_{i,j,k+1}}{\Delta\sigma^{+2}(\lambda_k^2 + \lambda_k)} \right) \\
& + 2(\sigma-1) \frac{1}{x_l} \frac{\partial z_s}{\partial x} \left(\frac{\lambda_k^2\phi_{i+1,j,k+1} - \lambda_k^2\phi_{i-1,j,k+1} - \phi_{i+1,j,k-1} + \phi_{i-1,j,k-1}}{2\Delta\sigma_k^+(\lambda_k + \lambda_k^2)\Delta\xi} \right. \\
& \left. + \frac{(\lambda_k^2-1)\phi_{i-1,j,k} - (\lambda_k^2-1)\phi_{i+1,j,k}}{2\Delta\sigma_k^+(\lambda_k + \lambda_k^2)\Delta\xi} \right) + 2(\sigma-1) \frac{1}{y_l} \frac{\partial z_s}{\partial y} \left(\frac{\lambda_k^2\phi_{i,j+1,k+1} - \lambda_k^2\phi_{i,j-1,k+1}}{2\Delta\sigma_k^+(\lambda_k + \lambda_k^2)\Delta\eta} \right. \\
& \left. + \frac{-\phi_{i,j+1,k-1} + \phi_{i,j-1,k-1} + (\lambda_k^2-1)\phi_{i,j-1,k} - (\lambda_k^2-1)\phi_{i,j+1,k}}{2\Delta\sigma_k^+(\lambda_k + \lambda_k^2)\Delta\eta} \right) \\
& + (\sigma-1) \left[\frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + \frac{2}{\pi} \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) \right] \left(\frac{\lambda_k^2\phi_{i,j,k+1}}{\Delta\sigma_k^+(\lambda_k + \lambda_k^2)} \right. \\
& \left. + \frac{-(\lambda_k^2-1)\phi_{i,j,k} - \phi_{i,j,k-1}}{\Delta\sigma_k^+(\lambda_k + \lambda_k^2)} \right) \\
& = -\frac{1}{T_h} \left[\pi \left(\frac{1}{x_l} \frac{\partial u_0}{\partial \xi} + \frac{1}{y_l} \frac{\partial v_0}{\partial \eta} \right) + (\sigma-1) \left(\frac{\partial u_0}{\partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial x} + \frac{\partial v_0}{\partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{\partial w_0}{\partial \sigma} \right] \quad (2.131)
\end{aligned}$$

Agrupando correctamente los términos semejantes, tenemos que la ecua-

ción correspondiente para el sistema de ecuaciones para los nodos internos es

$$\begin{aligned}
& - \left(\frac{2\pi}{x_l^2 \Delta \xi^2} + \frac{2\pi}{y_l^2 \Delta \eta^2} + V1 \frac{2}{\Delta \sigma^{+2} \lambda_k} + V2 \frac{(\lambda_k - 1)}{\Delta \sigma^{+} \lambda_k} \right) \phi_{i,j,k} + V3 \phi_{i,j-1,k-1} \\
& + V4 \phi_{i-1,j,k-1} + \left(V1 \frac{2}{\Delta \sigma^{+2} (\lambda_k^2 + \lambda_k)} - V2 \frac{1}{\Delta \sigma^{+2} (\lambda_k^2 + \lambda_k)} \right) \phi_{i,j,k-1} \\
& - V4 \phi_{i+1,j,k-1} - V3 \phi_{i,j+1,k-1} + \left(\frac{\pi}{y_l^2 \Delta \eta^2} + V7 \right) \phi_{i,j-1,k} \\
& + \left(\frac{\pi}{x_l^2 \Delta \xi^2} + V8 \right) \phi_{i-1,j,k} + \left(\frac{\pi}{x_l^2 \Delta \xi^2} - V8 \right) \phi_{i+1,j,k} + \left(\frac{\pi}{y_l^2 \Delta \eta^2} - V7 \right) \phi_{i,j+1,k} \\
& - V5 \phi_{i,j-1,k+1} - V6 \phi_{i-1,j,k+1} + \left(V1 \frac{2}{\Delta \sigma^{+} (\lambda_k + 1)} + V2 \frac{\lambda_k}{\Delta \sigma^{+} (\lambda_k + 1)} \right) \phi_{i,j,k+1} \\
& + V6 \phi_{i+1,j,k+1} + V5 \phi_{i,j+1,k+1} \\
& = - \frac{1}{T_h} \left[\pi \left(\frac{1}{x_l} \frac{\partial u_0}{\partial \xi} + \frac{1}{y_l} \frac{\partial v_0}{\partial \eta} \right) + (\sigma - 1) \left(\frac{\partial u_0}{\partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial x} + \frac{\partial v_0}{\partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{\partial w_0}{\partial \sigma} \right] \quad (2.132)
\end{aligned}$$

donde

$$V1 = \frac{(\sigma - 1)^2}{\pi} \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) + \frac{T_v}{T_h} \frac{1}{\pi} \quad (2.133)$$

$$V2 = (\sigma - 1) \left[\frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + \frac{2}{\pi} \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) \right] \quad (2.134)$$

$$V3 = \frac{(\sigma - 1)}{y_l \Delta \sigma^{+} (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \quad (2.135)$$

$$V4 = \frac{(\sigma - 1)}{x_l \Delta \sigma^{+} (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \quad (2.136)$$

$$V5 = \frac{\lambda_k (\sigma - 1)}{y_l \Delta \sigma^{+} (\lambda_k + 1) \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \quad (2.137)$$

$$V6 = \frac{\lambda_k (\sigma - 1)}{x_l \Delta \sigma^{+} (\lambda_k + 1) \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \quad (2.138)$$

$$V7 = \frac{(\sigma - 1) (\lambda_k - 1)}{y_l \Delta \sigma^{+} \lambda_k \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \quad (2.139)$$

$$V8 = \frac{(\sigma - 1) (\lambda_k - 1)}{x_l \Delta \sigma^{+} \lambda_k \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \quad (2.140)$$

2.6.2. Ecuaciones Correspondientes a Nodos del Contorno

2.6.2.1. Nodos de Número de Referencia 1

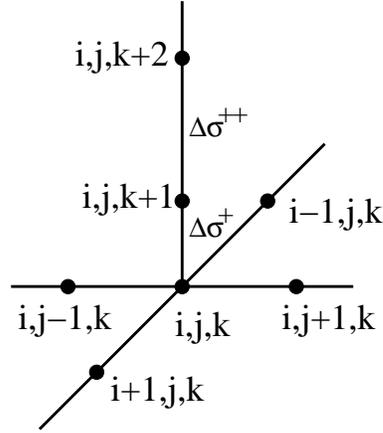


Figura 2.9: Número de referencia 1

$$\left[\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + \frac{T_v}{T_h} \right] \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} = \frac{\pi}{T_h} \left[\left(u_0 + \frac{T_h}{x_l} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x} + \left(v_0 + \frac{T_h}{y_l} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0 \right] \quad (2.141)$$

Sea,

$$V9 = \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + \frac{T_v}{T_h} \quad (2.142)$$

Sustituyendo en la ecuación (2.141), los esquemas de las derivadas en diferencias finitas correspondientes tenemos,

$$\begin{aligned} & \frac{\pi}{2y_l \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \phi_{i,j-1,k} + \frac{\pi}{2x_l \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \phi_{i-1,j,k} - V9 \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta \sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \phi_{i,j,k} \\ & - \frac{\pi}{2x_l \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \phi_{i+1,j,k} - \frac{\pi}{2y_l \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \phi_{i,j+1,k} + V9 \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta \sigma^+} \phi_{i,j,k+1} \\ & - V9 \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta \sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \phi_{i,j,k+2} \\ = & \frac{\pi}{T_h} \left(u_0 \frac{\partial z_s}{\partial x} + v_0 \frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0 \right) \end{aligned} \quad (2.143)$$

2.6.2.2. Nodos de Número de Referencia 2

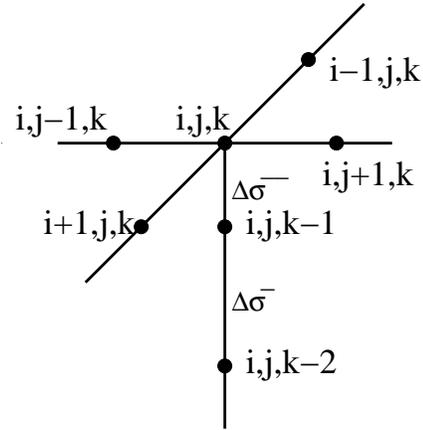


Figura 2.10: Número de referencia 2

$$\frac{\partial \phi}{\partial \sigma} = 0 \quad (2.144)$$

$$\frac{(2 + \lambda_{k-1})}{\Delta \sigma_k^- (1 + \lambda_{k-1})} \phi_{i,j,k} - \frac{(1 + \lambda_{k-1})}{\Delta \sigma_k^- \lambda_{k-1}} \phi_{i,j,k-1} + \frac{1}{\Delta \sigma_k^- (\lambda_{k-1} + \lambda_{k-1}^2)} \phi_{i,j,k-2} = 0 \quad (2.145)$$

2.6.2.3. Nodos de Número de Referencia 3

$$\phi_{i,j,k} = 0 \quad (2.146)$$

2.6.2.4. Nodo de Número de Referencia 4

Al sustituir en la ecuación (2.141), los esquemas de las derivadas en diferencias finitas (2.122), (2.125) y (2.126), y agrupando correctamente tenemos,

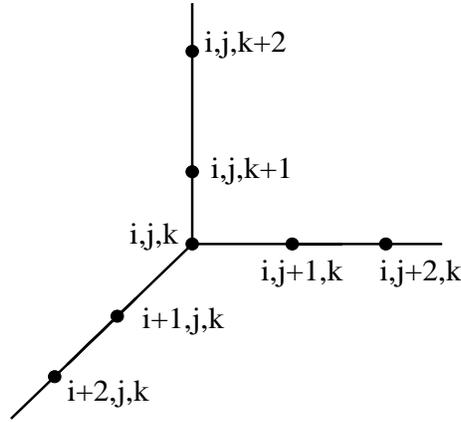


Figura 2.11: Número de referencia 4

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{3\pi}{2x_l \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} + \frac{3\pi}{2y_l \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} - V9 \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta \sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \right) \phi_{i,j,k} - \frac{2\pi}{x_l \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \phi_{i+1,j,k} \\
 & + \frac{\pi}{2x_l \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \phi_{i+2,j,k} - \frac{2\pi}{y_l \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \phi_{i,j+1,k} + \frac{\pi}{2y_l \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \phi_{i,j+2,k} \\
 & + V9 \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta \sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - V9 \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta \sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \phi_{i,j,k+2} \\
 = & \frac{\pi}{T_h} \left(u_0 \frac{\partial z_s}{\partial x} + v_0 \frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0 \right) \tag{2.147}
 \end{aligned}$$

2.6.2.5. Nodo de Número de Referencia 5

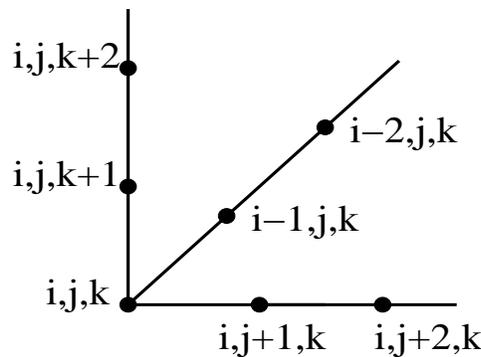


Figura 2.12: Número de referencia 5

Sustituyendo los esquemas de las derivadas en diferencias finitas, hallados en las ecuaciones (2.122), (2.126) y (2.129) en la ecuación (2.141), y agrupando correctamente la ecuación resultante es,

$$\begin{aligned}
& -\frac{\pi}{2x_l\Delta\xi}\frac{\partial z_s}{\partial x}\phi_{i-2,j,k} + \frac{2\pi}{x_l\Delta\xi}\frac{\partial z_s}{\partial x}\phi_{i-1,j,k} \\
& -\left(\frac{3\pi}{2x_l\Delta\xi}\frac{\partial z_s}{\partial x} + \frac{3\pi}{2y_l\Delta\eta}\frac{\partial z_s}{\partial y} + Vg\frac{2\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)}\right)\phi_{i,j,k} \\
& -\frac{2\pi}{y_l\Delta\eta}\frac{\partial z_s}{\partial y}\phi_{i,j+1,k} + \frac{\pi}{2y_l\Delta\eta}\frac{\partial z_s}{\partial y}\phi_{i,j+2,k} \\
& +Vg\frac{\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+}\phi_{i,j,k+1} - Vg\frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)}\phi_{i,j,k+2} \\
& = \frac{\pi}{T_h}\left(u_0\frac{\partial z_s}{\partial x} + v_0\frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0\right)
\end{aligned} \tag{2.148}$$

2.6.2.6. Nudo de Número de Referencia 6

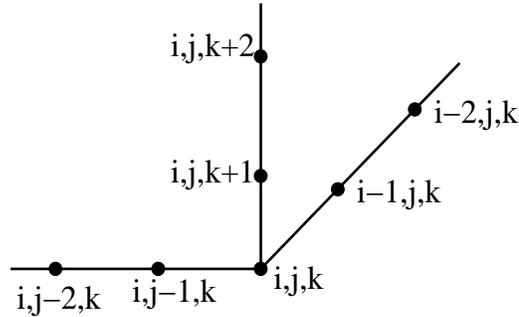


Figura 2.13: Número de referencia 6

Reemplazando en la ecuación (2.141), los esquemas de las derivadas en diferencias finitas de las ecuaciones (2.122), (2.129) y (2.130), tenemos la siguiente ecuación,

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\pi}{2y_l\Delta\eta}\frac{\partial z_s}{\partial y}\phi_{i,j-2,k} + \frac{2\pi}{y_l\Delta\eta}\frac{\partial z_s}{\partial y}\phi_{i,j-1,k} - \frac{\pi}{2x_l\Delta\xi}\frac{\partial z_s}{\partial x}\phi_{i-2,j,k} \\
 & + \frac{2\pi}{x_l\Delta\xi}\frac{\partial z_s}{\partial x}\phi_{i-1,j,k} - \left(\frac{3\pi}{2x_l\Delta\xi}\frac{\partial z_s}{\partial x} + \frac{3\pi}{2y_l\Delta\eta}\frac{\partial z_s}{\partial y} + Vg\frac{2\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \right)\phi_{i,j,k} \\
 & + Vg\frac{\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+}\phi_{i,j,k+1} - Vg\frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)}\phi_{i,j,k+2} \\
 = & \frac{\pi}{T_h}\left(u_0\frac{\partial z_s}{\partial x} + v_0\frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0\right) \tag{2.149}
 \end{aligned}$$

2.6.2.7. Nodo de Número de Referencia 7

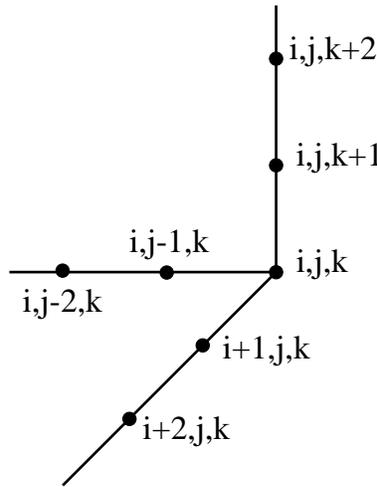


Figura 2.14: Número de referencia 7

Sustituyendo los esquemas (2.122), (2.125) y (2.130), en la ecuación (2.141) tenemos

$$\begin{aligned}
& -\frac{\pi}{2y_l\Delta\eta}\frac{\partial z_s}{\partial y}\phi_{i,j-2,k} + \frac{2\pi}{y_l\Delta\eta}\frac{\partial z_s}{\partial y}\phi_{i,j-1,k} \\
& + \left(\frac{3\pi}{2x_l\Delta\xi}\frac{\partial z_s}{\partial x} - \frac{3\pi}{2y_l\Delta\eta}\frac{\partial z_s}{\partial y} - Vg\frac{2\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \right) \phi_{i,j,k} \\
& - \frac{2\pi}{x_l\Delta\xi}\frac{\partial z_s}{\partial x}\phi_{i+1,j,k} + \frac{\pi}{2x_l\Delta\xi}\frac{\partial z_s}{\partial x}\phi_{i+2,j,k} + Vg\frac{\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+}\phi_{i,j,k+1} \\
& - Vg\frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)}\phi_{i,j,k+2} \\
= & \frac{\pi}{T_h} \left(u_0\frac{\partial z_s}{\partial x} + v_0\frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0 \right) \tag{2.150}
\end{aligned}$$

2.6.2.8. Nodos de Número de Referencia 8

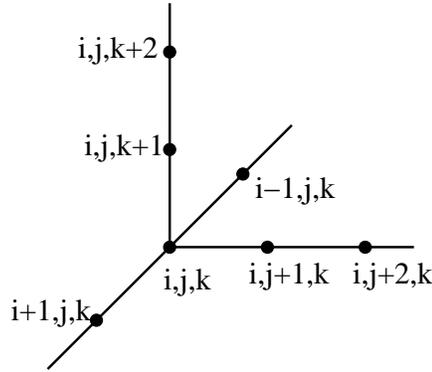


Figura 2.15: Número de referencia 8

Análogamente empleando los esquemas encontrados en la tabla (2.3)

$$\begin{aligned}
& \frac{\pi}{2x_l\Delta\xi}\frac{\partial z_s}{\partial x}\phi_{i-1,j,k} + \left(\frac{3\pi}{2y_l\Delta\eta}\frac{\partial z_s}{\partial y} - Vg\frac{2\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)} \right) \phi_{i,j,k} \\
& - \frac{\pi}{2x_l\Delta\xi}\frac{\partial z_s}{\partial x}\phi_{i+1,j,k} - \frac{2\pi}{y_l\Delta\eta}\frac{\partial z_s}{\partial y}\phi_{i,j+1,k} + \frac{\pi}{2y_l\Delta\eta}\frac{\partial z_s}{\partial y}\phi_{i,j+2,k} \\
& + Vg\frac{\lambda_{k+1}+1}{\Delta\sigma^+}\phi_{i,j,k+1} - Vg\frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+(\lambda_{k+1}+1)}\phi_{i,j,k+2} \\
= & \frac{\pi}{T_h} \left(u_0\frac{\partial z_s}{\partial x} + v_0\frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0 \right) \tag{2.151}
\end{aligned}$$

2.6.2.9. Nodos de Número de Referencia 9

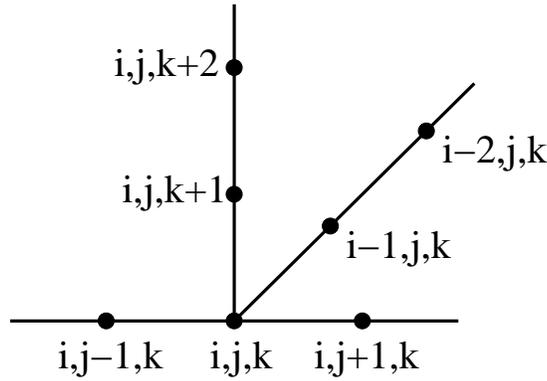


Figura 2.16: Número de referencia 9

Tomando los esquemas en diferencias finitas de la tabla (2.3) obtenemos

$$\begin{aligned}
 & \frac{\pi}{2y_l \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \phi_{i,j-1,k} - \frac{\pi}{2x_l \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \phi_{i-2,j,k} + \frac{2\pi}{x_l \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \phi_{i-1,j,k} \\
 & - \left(\frac{3\pi}{2x_l \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} + Vg \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta \sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \right) \phi_{i,j,k} - \frac{\pi}{2y_l \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \phi_{i,j+1,k} \\
 & + Vg \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta \sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - Vg \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta \sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \phi_{i,j,k+2} \\
 = & \frac{\pi}{T_h} \left(u_0 \frac{\partial z_s}{\partial x} + v_0 \frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0 \right) \tag{2.152}
 \end{aligned}$$

2.6.2.10. Nodos Número de Referencia 10

De manera similar a los casos anteriores tenemos

$$\begin{aligned}
 & - \frac{\pi}{2y_l \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \phi_{i,j-2,k} + \frac{2\pi}{y_l \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \phi_{i,j-1,k} + \frac{\pi}{2x_l \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \phi_{i-1,j,k} \\
 & - \left(\frac{3\pi}{2y_l \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} + Vg \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta \sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \right) \phi_{i,j,k} - \frac{\pi}{2x_l \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \phi_{i+1,j,k} \\
 & + Vg \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta \sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - Vg \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta \sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \phi_{i,j,k+2} \\
 = & \frac{\pi}{T_h} \left(u_0 \frac{\partial z_s}{\partial x} + v_0 \frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0 \right) \tag{2.153}
 \end{aligned}$$

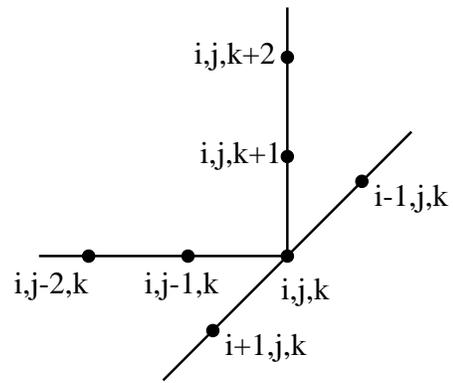


Figura 2.17: Número de referencia 10

2.6.2.11. Nodos Número de Referencia 11

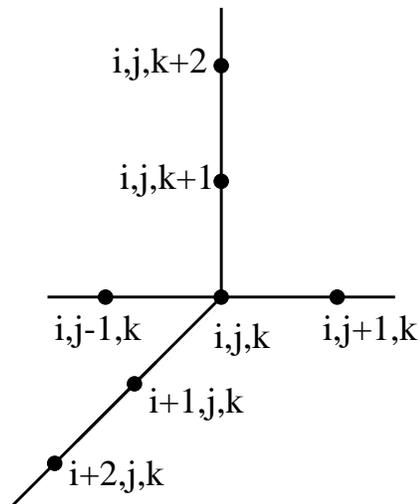


Figura 2.18: Número de referencia 11

Por último los esquemas en diferencias finitas obtenidos son,

$$\begin{aligned}
& \frac{\pi}{2y_l \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \phi_{i,j-1,k} + \left(\frac{3\pi}{2x_l \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} - Vg \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta \sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \right) \phi_{i,j,k} \\
& - \frac{2\pi}{x_l \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \phi_{i+1,j,k} + \frac{\pi}{2x_l \Delta \xi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \phi_{i+2,j,k} - \frac{\pi}{2y_l \Delta \eta} \frac{\partial z_s}{\partial y} \phi_{i,j+1,k} \\
& + Vg \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta \sigma^+} \phi_{i,j,k+1} - Vg \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta \sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \phi_{i,j,k+2} \\
& = \frac{\pi}{T_h} \left(u_0 \frac{\partial z_s}{\partial x} + v_0 \frac{\partial z_s}{\partial y} - w_0 \right) \tag{2.154}
\end{aligned}$$

2.7. Resolución del Sistema de Ecuaciones

2.7.1. Algoritmo Bi-CGSTAB

El método para resolver el sistema de ecuaciones es el Bi-CGSTAB, propuesto por [68]. Es un método de biortogonalización que tiene la ventaja de que las fórmulas de recurrencia son reducidas y el almacenamiento no aumenta con el número de iteraciones.

Se introduce además un parámetro $\tilde{\omega}_i$ en cada iteración para estabilizar o suavizar la convergencia, que se construye de la forma siguiente,

$$\mathbf{r}'_i = \psi_i(\mathbf{A}) \phi_i(\mathbf{A}) \mathbf{r}_0 \tag{2.155}$$

donde $\psi_i(t)$ se define de forma recurrente,

$$\psi_{i+1}(t) = (1 - \tilde{\omega}_i t) \psi_i(t) \tag{2.156}$$

Si obtenemos $\tilde{\omega}_i$ a partir del residuo del sistema original sin preconditionar en lugar del preconditionado, resulta (ver la variante BICGSTAB-P en [68]),

$$\tilde{\omega}_i = \frac{\langle \mathbf{t}, \mathbf{s} \rangle}{\langle \mathbf{t}, \mathbf{t} \rangle} \quad (2.157)$$

En este caso, por tanto, se obtiene el siguiente algoritmo,

Algoritmo BI-CGSTAB

Aproximación inicial $\mathbf{x}_0 \cdot \mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$;

$\hat{\mathbf{r}}_0$ es arbitrario, tal que $\langle \hat{\mathbf{r}}_0, \mathbf{r}_0 \rangle \neq 0$, p.e., $\hat{\mathbf{r}}_0 = \mathbf{r}_0$;

$\hat{\rho}_0 = \tilde{\alpha}_0 = \tilde{\omega}_0 = 1$

$\mathbf{p}_0 = \mathbf{v}_0 = \mathbf{0}$; Mientras $\| \mathbf{r}_{i-1} \| / \| \mathbf{r}_0 \| \geq \varepsilon$ ($i = 1, 2, 3, \dots$), hacer

Resolver $\mathbf{M}\mathbf{z} = \mathbf{r}_{i-1}$

$\hat{\rho}_i = \langle \hat{\mathbf{r}}_0, \mathbf{z} \rangle$

$\tilde{\beta}_i = (\hat{\rho}_i / \hat{\rho}_{i-1})(\tilde{\alpha}_{i-1} / \tilde{\omega}_{i-1})$

$\mathbf{p}_i = \mathbf{z} + \tilde{\beta}_i(\mathbf{p}_{i-1} - \tilde{\omega}_{i-1}\mathbf{v}_{i-1})$

$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{p}_i$; Resolver $\mathbf{M}\mathbf{v}_i = \mathbf{y}$

$\tilde{\alpha}_i = \frac{\hat{\rho}_i}{\langle \hat{\mathbf{r}}_0, \mathbf{v}_i \rangle}$

$\mathbf{s} = \mathbf{r}_{i-1} - \tilde{\alpha}_i\mathbf{y}$

$\mathbf{u} = \mathbf{z} - \tilde{\alpha}_i\mathbf{v}_i$

$\mathbf{t} = \mathbf{A}\mathbf{u}$

$\tilde{\omega}_i = \frac{\langle \mathbf{t}, \mathbf{s} \rangle}{\langle \mathbf{t}, \mathbf{t} \rangle}$

$\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_{i-1} + \tilde{\alpha}_i\mathbf{p}_i + \tilde{\omega}_i\mathbf{u}$

$\mathbf{r}_i = \mathbf{s} - \tilde{\omega}_i\mathbf{t}$;

Fin

Como el sistema de ecuaciones resultante $Ax = b$ es no simétrico, se recurriría a un método lineal de resolución de sistemas de ecuaciones apropiado. Aquí se ha aplicado el algoritmo de biortogonalización Bi-CGSTAB ya que este método ha mostrado su eficiencia para resolver este tipo de sistemas lineales

de ecuaciones que resultan de la discretización en diferencias finitas.

Para mejorar su convergencia, existen varios preconditionadores clásicos, diagonal (A), $SSOR(w)$, e $ILU(0)$ [33].

Capítulo 3

Modelización del Transporte de Contaminantes en la Atmósfera

A partir del campo de velocidades del viento obtenido en el capítulo anterior, construimos el modelo de dispersión de contaminantes. Empleamos para la ecuación de convección-difusión-reacción de una especie contaminante i un modelo euleriano, teniendo en cuenta las reacciones químicas, las eliminaciones debidas a las precipitaciones (deposición húmeda), las emisiones y la deposición seca.

3.1. Modelo de Contaminación Atmosférica

En un modelo euleriano, la no-homogeneidad y la no-estacionalidad del viento y de las turbulencias introducen complejidades que hacen que, las velocidades verticales medias no pueden despreciarse. Resulta entonces que la ecuación de transporte-difusión se puede escribir, para una especie contami-

nante i , de la forma [22].

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i - \vec{\nabla} \cdot (K_i \vec{\nabla} c_i) = f_i \quad i = 1, \dots, p, \quad \text{en } \Omega \quad (3.1)$$

donde p es el número de especies contaminantes consideradas, $c_i = c_i(x_1, x_2, x_3, t)$ representa la concentración media del contaminante i , \vec{v} es el campo de velocidades del fluido obtenido en el modelo del capítulo anterior, $K_i = [K_{i1}(x_1, x_2, x_3), K_{i2}(x_1, x_2, x_3), K_{i3}(x_1, x_2, x_3)]$ es el tensor (diagonal) de difusividad, y finalmente, $f_i = f_i(c_1, c_2, \dots, c_p)$ representa las fuentes externas.

El primer término representa la variación de concentración del contaminante i con el tiempo (convección); el segundo la entrada neta de contaminante asociada al flujo atmosférico (advección); el tercer término la variación de la concentración de contaminante debido a la difusión turbulenta; el cuarto término es una fuente o sumidero genérico (por ejemplo, producción o destrucción química y emisiones para concentraciones de contaminantes modelados, gradientes de presión, fuerzas de gravedad y de coriolis para conservación del momento, calentamiento térmico para conservación de la energía y evaporación para modelado del vapor de agua). Esta ecuación general de transporte puede ser muy compleja y no-lineal para la mayoría de sistemas atmosféricos. La no-linealidad y el acoplamiento (coupling) aumentan debido al segundo y cuarto términos.

3.1.1. Condiciones de Contorno

La ecuación de convección-difusión-reacción se completa con una distribución inicial de contaminantes c_i con $i = 1, \dots, p$, que se supone conocida en todo

el dominio Ω ,

$$c_i(x_1, x_2, x_3, 0) = c_i^0(x_1, x_2, x_3) \quad i = 1, \dots, p, \quad \text{en } \Omega \quad (3.2)$$

Se establecen además condiciones de contorno de tipo Dirichlet en Γ_a (fronteras verticales del dominio) y de tipo mixto en Γ_b (siendo el terreno Γ_{b0} y la frontera superior Γ_{b1}) que aseguren la unicidad de la solución. Tenemos entonces

$$c_i = C_i(x_1, x_2, x_3, t) \quad i = 1, \dots, p, \quad \text{en } \Gamma_a \quad (3.3)$$

$$-\vec{n} \cdot \mathbf{K}_i \vec{\nabla} c_i = 0 \quad i = 1, \dots, p, \quad \text{en } \Gamma_{b1} \quad (3.4)$$

$$-\vec{n} \cdot \mathbf{K}_i \vec{\nabla} c_i = v_{di} c_i \quad i = 1, \dots, p, \quad \text{en } \Gamma_{b0} \quad (3.5)$$

siendo v_{di} la velocidad de deposición seca sobre el terreno.

La concentración C_i se tomará igual al valor de fondo de la zona de estudio, aunque bien puede considerarse nulo dicho valor ante el desconocimiento de esta concentración de fondo. Este es un valor que debe suministrarse al modelo en forma de un campo inicial que bien puede construirse a partir de medidas experimentales en la zona, obtenidas de una red de medidas de inmisión. Como primera aproximación puede considerarse un valor promedio de fondo de la región.

Las caras verticales del dominio situadas a barlovento reciben una contribución nula de la fuente emisora, por lo que el valor de la concentración de contaminante en esas caras permanecerá inalterado en el tiempo e igual a la

concentración global de fondo de la región. Las dimensiones del dominio son tales que las paredes verticales en la dirección del viento (a sotavento) están lo suficientemente alejadas como para considerar que en ellas la concentración de contaminante permanece también inalterada e igual a la concentración de fondo regional.

Considerando una altura suficientemente grande del dominio de estudio, el flujo del contaminante hacia las capas más altas de la atmósfera puede considerarse nulo. Por tanto, puede imponerse una condición de flujo libre en la frontera superior del dominio y tomaremos el segundo término de la ecuación igual a cero.

En la subcapa laminar adyacente al terreno tiene lugar el fenómeno de deposición seca, por el cual se establece un flujo de contaminante hacia el terreno al ser absorbidos los mismos por la vegetación o el propio terreno.

3.1.1.1. Deposición Seca

La deposición seca se desglosa en dos: de una parte el transporte de los contaminantes a la superficie de la tierra; y de otra la interacción física y química entre la superficie y el contaminante. El primero es un proceso de mecánica de fluidos, el segundo es primariamente un proceso químico. Actualmente ninguno está completamente caracterizado. El problema se dificulta por la interacción entre los contaminantes y las superficies biogénicas, donde la recepción del contaminante se intensifica o retarda por la actividad vegetal, que varía con el tiempo.

Es muy difícil medir el flujo de la deposición de los contaminantes desde

la atmósfera, aunque se han hecho avances significativos en los últimos años. Muchos factores afectan a la deposición seca, pero por conveniencia computacional los modelos de calidad de aire recurren a utilizar una cantidad simple, llamada velocidad de deposición seca que se denota por v_{di} , como se mencionó anteriormente.

Los valores de la velocidad de deposición que se emplean en el modelo se presentan en la tabla (3.1).

Contaminante	Vd_i en m/s
SO_2	0.0044
SO_4^-	0.0026
NO_x	0.0013
NO_3^-	0.0054

Tabla 3.1: Valores para la deposición seca. Por [5] para la familia de compuestos de azufre y por [3] para los compuestos de la familia del nitrógeno

3.2. Estudio del Término Fuente

Si en el proceso de dispersión de contaminantes en la atmósfera se tiene en cuenta la existencia de reacciones químicas, el término fuente para una especie i puede entenderse compuesto de tres aportaciones,

$$f_i = E_i + R_i + P_i \quad (3.6)$$

donde, $E_i(x_1, x_2, x_3, t)$ es la emisión directa de la especie i a la atmósfera, $R_i(x_1, x_2, x_3, t)$ es el término de formación o desaparición de la especie i por medio de reaccio-

nes químicas y $P_i(x_1, x_2, x_3, t)$ el término de eliminación de la especie i debido a las precipitaciones (deposición húmeda).

Dado que la velocidad de reacción química y velocidad de desaparición debido a la deposición húmeda presentan la misma relación funcional (este modelo considera R_i y P_i lineales), podemos agrupar los términos correspondientes a ambos fenómenos así

$$f_i = E_i + \sum_{j=1}^p \alpha_{ij} c_j \quad (3.7)$$

3.2.1. Emisiones Directas

3.2.1.1. Fuente Puntual

Las fuentes puntuales que emiten con una concentración inicial e_{i_0} y localizada en un punto de coordenadas $(x_{1_0}, x_{2_0}, x_{3_0})$ pueden modelarse de acuerdo con la teoría de distribuciones como el producto de la intensidad de emisión y de la distribución delta de Dirac en la forma,

$$E_i = e_{i_0}(t) \cdot \delta(x_1 - x_{1_0}) \cdot \delta(x_2 - x_{2_0}) \cdot \delta(x_3 - x_{3_0}) \quad (3.8)$$

Por otra parte una emisión instantánea puede modelarse mediante,

$$E_i = e_{i_0} \cdot \delta(x_1 - x_{1_0}) \cdot \delta(x_2 - x_{2_0}) \cdot \delta(x_3 - x_{3_0}) \cdot \delta(t - t_0) \quad (3.9)$$

En realidad, la expresión (3.9) surge de (3.8) sin más que considerar

$$e_{i_0}(t) = e_{i_0} \cdot \delta(t - t_0) \quad (3.10)$$

lo que nos lleva a analizar la relación funcional que liga el término de emisiones directas con el tiempo. Así, podemos encontrar las siguientes situaciones de

aplicación.

Análisis de Diagnóstico: En esta situación, esta relación funcional debe determinarse bien utilizando una evolución temporal de las emisiones registradas o bien mediante un análisis estadístico de los datos históricos acumulados de emisiones, determinándose así la situación más probable con un grado de confianza elevado.

Efecto de una Sobreemisión: Una sobreemisión puede modelarse mediante la expresión (3.9) sin más que considerar como intensidad de emisión la sobreemisión prevista. La aportación de este término de sobreemisión puede considerarse añadida a la expresión que modela la emisión en el tiempo. Por tanto, la expresión correspondiente al perfil de emisiones considerando el efecto de las sobreemisiones será del tipo,

$$E_i = \left(\sum_{j=1}^n s_i^j \cdot \delta(t - t_j) + e_{i_0}(t) \right) \cdot \delta(x_1 - x_{1_0}) \cdot \delta(x_2 - x_{2_0}) \cdot \delta(x_3 - x_{3_0}) \quad (3.11)$$

expresión en la que n representa el número de sobreemisiones previstas, t_j representa el instante que corresponde a la sobreemisión j de densidad s_i^j en la especie i .

Análisis de Pronóstico: En esta situación, la evolución temporal de las emisiones debe determinarse con base en estimaciones de la utilización prevista de la central, tipo y composición del combustible a utilizar, etc. También es posible modelar el efecto de la emisión directa de contaminantes mediante una fuente distribuida en volumen, de forma que la intensidad volumétrica de emisión sea el resultado de distribuir uniformemente en dicho volumen la intensidad de emisión puntual. Esta forma de modelar la emisión puntual permite eliminar ciertos problemas de estabilidad numérica que introduce una fuente puntual en el modelo.

3.2.1.2. Modelo de Pluma Gaussiana

El modelo de pluma Gaussiana es el más común de los modelos de polución del aire. Se basa en una fórmula simple que describe el campo tridimensional de concentración generado por una fuente puntual bajo condiciones meteorológicas estacionarias y de emisión. Aunque en el modelo de pluma Gaussiano por simplicidad la pluma se mueve en la dirección del eje x positivo, en un sistema de referencia general, la fórmula de la pluma gaussiana se expresa como,

$$c = \frac{Q}{2\pi\sigma_h\sigma_z|\bar{u}|} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta_{cw}}{\sigma_h}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z_s + \Delta h - z_r}{\sigma_z}\right)^2\right] \quad (3.12)$$

donde $c(s, r)$ es la concentración en $r(x_r, y_r, z_r)$ debida a las emisiones en $s = (x_s, y_s, z_s)$; Q es la tasa de emisión; $\sigma_h(j_h, d)$ y $\sigma_z(j_z, d)$ son las desviaciones estándar (horizontal y vertical respectivamente) de la distribución espacial de concentración de la pluma (frecuentemente σ_h es referida como σ_y); j_h y j_z son los estados de turbulencia horizontal y vertical; d es la distancia a favor del viento del receptor desde la fuente

$$d = \frac{(r - s)\bar{u}}{|\bar{u}|} \quad (3.13)$$

siendo \bar{u} el vector de la velocidad media del viento ($\bar{u}_x, \bar{u}_y, \bar{u}_z$) a la altura de emisión (se asume $\bar{u}_z \ll \sqrt{\bar{u}_x^2 + \bar{u}_y^2}$); Δ_{cw} es la distancia en contra del viento, entre el receptor y la fuente (esto es, entre el receptor y el centro de la pluma)

$$\Delta_{cw} = \sqrt{|r - s|^2 - d^2} \quad (3.14)$$

y Δh es el ascenso de la pluma de emisión, que es una función de parámetros de emisión, meteorología y distancia a favor del viento d . La ecuación (3.12) se

aplica para $d > 0$; si $d \leq 0$, entonces $c = 0$.

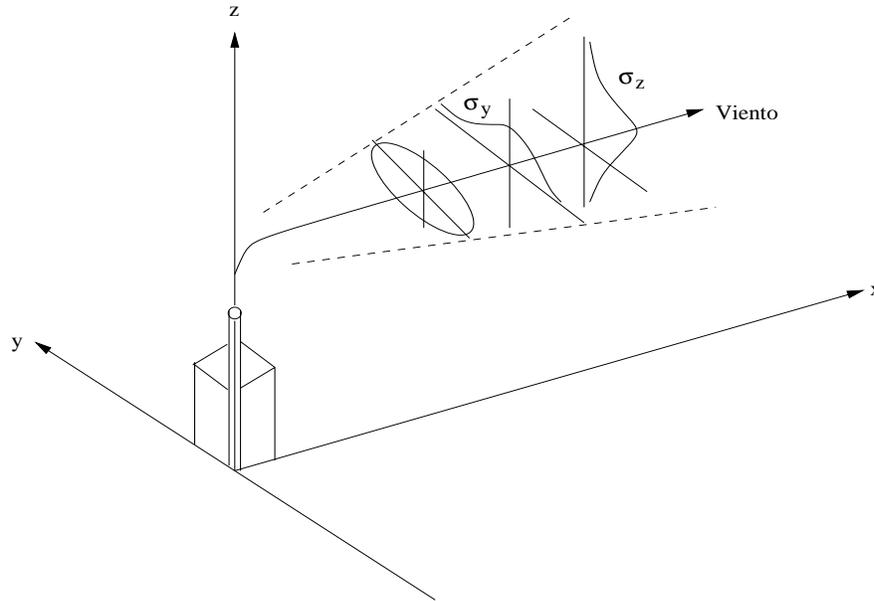


Figura 3.1: *Difusión de contaminantes desde una fuente puntual. Las concentraciones de contaminantes tienen distribuciones Gaussianas diferentes en la dirección horizontal (eje y) y en la dirección vertical (eje z)*

3.2.1.3. Cálculo de σ_y y σ_z

Las concentraciones estimadas por la ecuación (3.12) dependen fuertemente de un cálculo correcto de σ_y y σ_z , lo que constituye uno de los mayores desafíos para todas las aplicaciones que empleen el modelo de Gauss. En este trabajo presentamos un método general para estimar σ_y y σ_z basado en el cálculo de funciones no-dimensionales, mediante un uso directo de medidas de intensidad de la turbulencia, cuando éstas están disponibles.

Se propone para ello las siguientes ecuaciones [15]

$$\sigma_y = \sigma_\theta d S_y \left(\frac{t}{T_i} \right) \quad (3.15)$$

$$\sigma_z = \sigma_\phi d S_z \left(\frac{t}{T_i} \right) \quad (3.16)$$

donde σ_θ y σ_ϕ son las desviaciones estándar de los ángulos de acimut y de elevación del vector viento, d la distancia a favor del viento, T_i es un factor de normalización proporcional a T_l , la escala de tiempo Lagrangiana, (esto es $T_l = T_i/1,64$, donde T_i es el tiempo necesario para que S_y o S_z lleguen a ser igual a 0,5; S_y y S_z son siempre iguales a 1 para $t = 0$). Nótese que $\sigma_\theta = \arctan(\sigma_v/\bar{u})$ y $\sigma_\phi = \arctan(\sigma_w/\bar{u})$, para ángulos pequeños pueden aproximarse como $\sigma_\theta \simeq \sigma_v/\bar{u}$ y $\sigma_\phi \simeq \sigma_w/\bar{u}$.

A partir de datos de dispersión disponibles, [15] proporciona una evaluación preliminar de las formas precisas de S_y y S_z determinando T_i . [47] además tabuló S_y como una función universal solo de d . Esos valores tabulados fueron luego reformados por [24] como

$$S_y(d) = \begin{cases} (1 + 0,0308 d^{0,4548})^{-1} & \text{para } d \leq 10^4 \text{ m} \\ S_y(d) = 0,333 \left(\frac{10000}{d} \right)^{1/2} & \text{para } d > 10^4 \text{ m} \end{cases} \quad (3.17)$$

La anterior formulación de S_y es aceptada generalmente como la mejor manera de determinar σ_y y ha sido recomendada por el *American Meteorological Society Workshop on Stability Classification Schemes and Sigma Curves*. Sin embargo [48] sugiere una formulación diferente para S_y , que proporciona un mejor ajuste con los datos experimentales para valores pequeños de d y es consistente

con la teoría de subrango inercial

$$S_y = 0,617 \left[\frac{T_i}{t} - \frac{\left(\frac{T_i}{t}\right)^2}{5,25} \ln \left(1 + 5,25 \frac{t}{T_i} \right) \right]^{1/2} \quad (3.18)$$

No obstante, se necesita investigar más para evaluar completamente la validez de las anteriores fórmulas de S_y . En particular, la dependencia de S_y sólo de d es realmente cuestionable. Algunos experimentos numéricos de dispersión de partículas de Lagrange han confirmado un comportamiento de σ_y de acuerdo con la teoría estadística de difusión y muestran una variación de valores de σ_y , de la misma entrada de σ_θ , asociada con cambios en la estructura de autocorrelación de la dirección del viento (esto es, una correlación temporal mas alta en la dirección del viento θ , causa, como se espera, mayores valores de σ_y , aunque σ_θ sea el mismo).

La evaluación de S_z es todavía algo incierta. [24] proporciona una función S_z universal preliminar y recomienda su empleo provisional hasta que mas datos de campo permitan encontrar un esquema más preciso. En condiciones inestables, la función S_z depende de la capa de mezcla h , el tiempo de difusión t , la altura de escape efectiva h_e , la velocidad de fricción superficial \bar{v}^* y la escala longitudinal de Monin-Lobukov. Asimismo, [15] propone bajo condiciones neutrales y estables,

$$S_z = \begin{cases} \left(1 + 0,9 \left(\frac{t}{T_0} \right)^{1/2} \right)^{-1} & \text{para } z < 50 \text{ m} \\ \left(1 + 0,945 \left(\frac{t}{T_0} \right)^{0,8} \right)^{-1} & \text{para } z \geq 50 \text{ m} \end{cases} \quad (3.19)$$

en que el tiempo característico T_0 es $\simeq 50$ s.

3.2.1.4. Modelos de Emisión Gaussiano

Los modelos de estructuras se han desarrollados para tratar emisiones no estacionarias en condiciones de dispersión no homogéneas. Los métodos de estructuras tienen además la ventaja adicional de ser capaces, al menos teóricamente, de simular condiciones de calma o vientos de baja intensidad.

El modelo de emisión Gaussiano asume que cada emisión de contaminante de duración Δt inyecta en la atmósfera una masa $\Delta M = Q\Delta t$, donde Q es el coeficiente de emisión variable con el tiempo. El centro de la estructura que contiene la masa ΔM sufre advección según el vector de viento local dependiente del tiempo. Si en el instante t , el centro de una estructura se localiza en $p(t) = (x_p, y_p, z_p)$, entonces la concentración debida a esa estructura en el receptor $r = (x_r, y_r, z_r)$ puede calcularse usando la fórmula básica de estructura Gaussiana,

$$\Delta c = \frac{\Delta M}{(2\pi)^{3/2}\sigma_h^2\sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x_p - x_r}{\sigma_h}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y_p - y_r}{\sigma_h}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z_p - z_r}{\sigma_z}\right)^2\right] \quad (3.20)$$

que con frecuencia se amplía para incorporar términos de reflexión y de deposición. Es de destacar que la integración analítica de la ecuación (3.20) en condiciones de transporte estacionarias y homogéneas da como resultado la fórmula de la ecuación de la pluma Gaussiana (3.12).

La ecuación (3.20) necesita de una evaluación apropiada de σ_h y σ_z . La concentración total de un receptor en el instante t se calcula añadiendo la contribución Δc de todas las estructuras existentes generadas por todas las fuentes. Señalar que la ecuación de la estructura (3.20) difiere de la ecuación de “pluma” (3.12), principalmente porque un término de difusión horizontal extra ha sido sustituido por el término de transporte, con la consecuente desaparición de la velocidad del viento \bar{u} . En otras palabras, en un modelo de estructura la velocidad del viento afecta al cálculo de la concentración solo controlando la densidad de estructuras en la región (esto es, cuanto mas baja es la velocidad del viento, más cerca estará una estructura de la siguiente generada por la misma fuente). Por tanto, al menos en teoría, un modelo de emisión puede manipular condiciones de calma o vientos de baja intensidad, representando esta aproximación la más avanzada y potente aplicación de la fórmula Gaussiana.

Derivaciones de las Ecuaciones Gaussianas

Las ecuaciones Gaussianas pueden derivarse de ambas consideraciones, la Euleriana y la Langrangiana. Esa es la razón por la que los modelos Gaussianos se discuten separadamente de los modelos Eulerianos y Langrangianos.

Hay varias maneras de obtener la ecuación de la pluma Gaussiana en estado estacionario (3.12). Se van a discutir brevemente dos métodos en esta sección.

- La Derivación Semiempírica:

La derivación semiempírica directa se realiza al asumir que la concentración c de la pluma a cada distancia x , a barlovento, tiene distribuciones Gaussianas independientes, tanto horizontal como verticalmente, por

tanto

$$c(x, y, z) = \text{const} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_h} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta_{cw}}{\sigma_h} \right)^2 \right] \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{h_e - z_r}{\sigma_z} \right)^2 \right] \quad (3.21)$$

donde x es la distancia a barlovento, en vez de d .

La condición de conservación de masa requiere que todos los flujos de concentración a través de cada plano (y, z) sea el mismo; es decir para cada x

$$Q = \int_{(y,z)} c(x, y, z) \bar{u} \, dy \, dz \quad (3.22)$$

que con la ecuación (3.21), resulta $\text{const} = Q/\bar{u}$, y por lo tanto da la ecuación (3.12).

- Pluma Gaussiana como Superposición de estructuras Gaussianas:

Una pluma puede representarse por una serie infinita de estructuras, donde cada estructura, localizada en x, y, z genera un campo de concentración

$$dc(x, y, z) = \frac{dM}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{x - x_r}{\sigma_x} \right)^2 + \left(\frac{y - y_r}{\sigma_y} \right)^2 + \left(\frac{z - z_r}{\sigma_z} \right)^2 \right] \right\} \quad (3.23)$$

en el receptor (x_r, y_r, z_r) , siendo $dM = Q dt = Q dx/\bar{u}$ la masa de la estructura. Entonces, si $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_h$, la integración a lo largo de x de la ecuación (3.23) nos da la ecuación (3.12).

3.2.2. Reacciones Químicas

En general, las reacciones químicas presentan expresiones no lineales de la concentración de las especies químicas consideradas. Se tomarán como especies significativas de estudio a las familias de contaminantes de azufre y nitrógeno por ser éstos los contaminantes más emitidos por las plantas generadoras de energía. Como especies primarias directamente emitidas se considera el dióxido de azufre SO_2 para la familia de compuestos de azufre y los óxidos de nitrógeno NO_x para la familia de compuestos de nitrógeno. Además consideramos las formaciones de los ácidos H_2SO_4 (ácido sulfúrico) y HNO_3 (ácido nítrico) correspondientes a las oxidaciones de ambas familias.

Tal como se mencionó anteriormente el proceso de transformación química de las especies contaminantes presenta en general una cinética no lineal, sin embargo al realizar las oportunas simplificaciones que eliminen los términos no lineales [34], el término de reacción química presentará la forma siguiente

$$R_{ij} = \bar{\alpha}_{ij} \cdot c_j \quad i, j = 1, 2, \dots, N \quad (3.24)$$

siendo los coeficientes $\bar{\alpha}_{ij}$ las constantes cinéticas de las reacciones en las que interviene la especie i , ya sea para formación de la especie (signo positivo) o para su desaparición (signo negativo). Para las especies consideradas en nuestro modelo lineal, SO_2 , H_2SO_4 , NO_x y HNO_3 , los coeficientes $\bar{\alpha}_{ij}$ representan la velocidad específica de formación o desaparición de dicha especie.

3.2.2.1. Reacciones Homogéneas en la Atmósfera

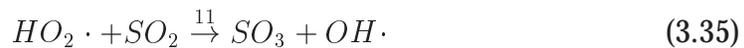
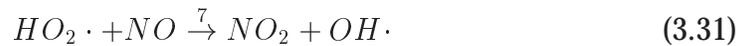
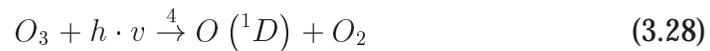
Habitualmente la mayoría de los contaminantes que resultan ser dañinos no son directamente emitidos, ya sea por fuentes antropogénicas o por fuentes

naturales, sino que son el resultado de un proceso de transformación química que tiene lugar en la atmósfera desde el momento en que los contaminantes primarios son emitidos. Es por tanto importante considerar el efecto que tienen estas reacciones sobre la dispersión de contaminantes, tanto desde un punto de vista cualitativo como cuantitativo. Éstas pueden clasificarse, atendiendo al estado físico en que se encuentren las diferentes sustancias reaccionantes, en homogéneas o heterogéneas.

Resulta imposible de todo punto considerar el efecto de todas estas reacciones debido a la complejidad del fenómeno físico-químico que envuelve a las mismas. Es por lo tanto necesario considerar muy detalladamente que reacciones serán predominante en una determinada situación y como podrá modelarse matemáticamente su comportamiento. A efectos de estudiar una simulación numérica en la que se considere el efecto de la reacción de contaminantes es especialmente importante tener en cuenta estas consideraciones, ya que el introducir una nueva especie intermedia involucrada en el proceso supondría la necesidad de añadir una nueva ecuación de dispersión para dicha especie, lo que se traduce a aumentar la dimensión del problema evolutivo, de por si ya bastante amplia.

A continuación se realizará una breve descripción de la química de las reacciones en fase homogénea que afectan a los miembros de la familia del nitrógeno, especialmente óxidos de nitrógeno, haciendo especial incapié en el carácter fotoquímico de las mismas. Se estudiará también la química de la familia del azufre en sus diferentes estados de oxidación e hidratación, por ser esta familia de compuestos la causante de mayores daños y la mayor causa de preocupación cuando se tratan temas relacionados con la contaminación.

Las reacciones químicas elementales de las familias de contaminantes consideradas se muestran a continuación



expresiones en las que M representa cualquier molécula capaz de absorber el exceso de energía vibracional, estabilizándose así la molécula de ozono O_3 formada. Esta molécula M podría ser perfectamente el oxígeno o el nitrógeno atmosférico.

Estas doce reacciones elementales modelan de forma completa el comportamiento en fase gaseosa de las principales sustancias contaminantes en la atmósfera. Intervienen además especies altamente reactivas, de corto período de vida en la atmósfera. Especies sobre las que se considerará una condición de

estado pseudo-estacionario pues dicha sustancia se forma por reacción química al mismo ritmo que desaparece.

El modelo tiene en cuenta doce sustancias, cuyas velocidades globales de formación vienen dadas por

$$\begin{aligned}
 \frac{d[O]}{dt} &= k_1 \cdot [NO_2] - k_2 \cdot [O] \cdot [O_2] \cdot [M] + k_5 \cdot [O(^1D)] \cdot [M] \\
 \frac{d[O(^1D)]}{dt} &= k_4 \cdot [O_3] - k_5 \cdot [O(^1D)] \cdot [M] - k_6 \cdot [O(^1D)] \cdot [H_2O] \\
 \frac{d[OH\cdot]}{dt} &= 2 \cdot k_6 \cdot [H_2O] \cdot [O(^1D)] + k_7 \cdot [H_2O] \cdot [NO] - k_8 \cdot [OH\cdot] \cdot [NO_2] \\
 &\quad - k_9 \cdot [OH\cdot] \cdot SO_2 + k_{11} \cdot [HO_2] \cdot [SO_2] \\
 \frac{d[HO_2]}{dt} &= -k_7 \cdot [HO_2] \cdot [NO] + k_{10} \cdot [HOSO_2] - [O_2] - k_{12} \cdot [HO_2] \cdot [SO_2] \\
 \frac{d[HOSO_2]}{dt} &= k_9 \cdot [OH\cdot] \cdot [SO_2] - k_{10} \cdot [HOSO_2] \cdot [O_3] \\
 \frac{d[O_3]}{dt} &= k_2 \cdot [O] \cdot [O_2] \cdot [M] - k_3 \cdot [O_3] \cdot [NO] - k_4 \cdot [O_3]
 \end{aligned}
 \tag{3.37}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{d[NO]}{dt} &= k_1 \cdot [NO_2] - k_7 \cdot [HO_2\cdot] \cdot [NO] - k_3 \cdot [O_3] \cdot [NO] \\
 \frac{d[NO_2]}{dt} &= -k_1 \cdot [NO_2] + k_3 \cdot [O_3] \cdot [NO] + k_7 \cdot [HO_2] \cdot [NO] \\
 &\quad - k_8 \cdot [OH\cdot] \cdot [NO_2] \\
 \frac{d[HNO_3]}{dt} &= k_8 \cdot [OH\cdot] \cdot [NO_2] \\
 \frac{d[SO_2]}{dt} &= -k_9 \cdot [OH\cdot] \cdot [SO_2] - k_{11} \cdot [HO_2] \cdot [SO_2] \\
 \frac{d[SO_3]}{dt} &= k_{10} \cdot [HOSO_2] \cdot [O_2] - k_{12} \cdot [SO_3] \cdot [H_2O] + k_{11} \cdot [HO_2\cdot] \cdot [SO_2] \\
 \frac{d[H_2SO_4]}{dt} &= k_{12} \cdot [SO_3] \cdot [H_2O]
 \end{aligned}$$

Las constantes cinéticas (k) de las reacciones (3.25) a (3.36) se recogen en la

tabla (3.2).

Reacción	Constante Cinética
1. $NO_2 + h \cdot \nu \rightarrow NO + O \cdot$	Depende de la radiación solar
2. $O \cdot + O_2 + M \rightarrow O_3 + M$	$6,0 \times 10^{-34} \times (T/300)^{-2,3}$
3. $O_3 + NO \rightarrow NO_2 + O_2$	$2,2 \times 10^{-12} \times e^{-1430/T}$
4. $O_3 + h \cdot \nu \rightarrow O(^1D) + O_2$	$0,0028 \cdot k_1$
5. $O(^1D) + M \rightarrow O \cdot + M$	$2,9 \times 10^{-11}$
6. $O(^1D) + H_2O \rightarrow 2 \cdot OH \cdot$	$2,2 \times 10^{-10}$
7. $HO_2 \cdot + NO \rightarrow NO_2 + OH \cdot$	$3,7 \times 10^{-12} \times e^{240/T}$
8. $OH \cdot + NO_2 \rightarrow HNO_3$	$1,1 \times 10^{-13}$
9. $OH \cdot + SO_2 \rightarrow HOSO_2 \cdot$	$1,1 \times 10^{-11}$
10. $HOSO_2 \cdot + O_2 \rightarrow HO_2 \cdot + SO_3$	—
11. $HO_2 \cdot + SO_2 \rightarrow SO_3 + OH \cdot$	1×10^{-8}
12. $SO_3 + H_2O \rightarrow H_2SO_4$	$9,1 \times 10^{-13}$

Tabla 3.2: Constantes cinéticas del conjunto de reacciones químicas adoptadas. Las unidades son tales que al expresar las concentraciones en $molec \cdot cm^{-3}$, la velocidad de reacción se expresa en $molec \cdot cm^{-3} \cdot s^{-1}$.

Del conjunto de reacciones anteriores podemos obtener los valores de las concentraciones de las sustancias sobre las que aplicamos la condición de estado pseudo-estacionario. Las sustancias sobre las cuales aplicamos dicha condi-

ción son: O , $O(^1D)$, $OH\cdot$, $HO_2\cdot$, $HOSO_2\cdot$ y $O_3\cdot$ obteniendo

$$\begin{aligned}
 [O(^1D)]_{ee} &= a \cdot \frac{k_1 \cdot k_4}{k_6 \cdot [H_2O]} \cdot \frac{[NO_2]}{k_3 \cdot [NO] + k_4 \cdot a} \\
 [O\cdot]_{ee} &= \frac{k_1 \cdot [NO_2] + k_5 \cdot [M] \cdot [O(^1D)]}{k_2 \cdot [O_2] \cdot [M]} \\
 [OH\cdot]_{ee} &= 2 \cdot a \cdot \frac{k_4 \cdot [O_3]}{k_8 \cdot [NO_2]} \\
 [HO_2\cdot]_{ee} &= 2 \cdot a \cdot \frac{k_9 \cdot [SO_2]}{k_7 \cdot [NO] + k_{11} \cdot [SO_2]} \cdot \frac{k_4 \cdot [O_3]}{k_8 \cdot [NO_2]} \\
 [O_3]_{ee} &= \frac{k_6}{a \cdot k_4} \cdot [O(^1D)] \cdot [H_2O] \tag{3.38}
 \end{aligned}$$

donde

$$a = \frac{1}{1 + \frac{k_5 \cdot [M]}{k_6 \cdot [H_2O]}} \tag{3.39}$$

Sustituyendo las expresiones dadas en (3.38) en las velocidades de reacción dadas en (3.37) tendríamos las expresiones de la velocidad de reacción de las diferentes especies involucradas.

En las expresiones (3.25) a (3.36) vamos a considerar de forma conjunta los óxidos de nitrógeno, en forma de NO_x , que resulta de la suma de la masa del NO y la del NO_2 . En términos de concentraciones molares se puede expresar como

$$[NO_x] = [NO] + [NO_2] \tag{3.40}$$

por tanto la velocidad de formación de $[NO_x]$ se calcula como la suma de las

velocidades de formación de $[NO]$ y la correspondiente al $[NO_2]$.

Sumando las velocidades de reacción correspondientes a ambas especies en las expresiones (3.37) y sustituyendo en éstas las concentraciones de estado estacionario representadas por (3.38) obtenemos las siguientes expresiones que representan las velocidades de reacción de las especies NO_x , HNO_3 , SO_2 y H_2SO_4 .

$$\begin{aligned} \frac{d[NO_x]}{dt} &= -2 \cdot a \cdot \frac{k_1 \cdot k_4 \cdot k_8 \cdot [NO_x]}{k_3 \cdot [NO] + k_4 \cdot a} \\ \frac{d[HNO_3]}{dt} &= 2 \cdot a \cdot \frac{k_1 \cdot k_4 \cdot k_8 \cdot [NO_x]}{k_3 \cdot [NO] + k_4 \cdot a} \\ \frac{d[SO_2]}{dt} &= -2 \cdot a \cdot \frac{k_1 \cdot k_4 \cdot k_9}{k_8} \cdot \frac{[SO_2]}{k_3 \cdot [NO] + k_4 \cdot a} \\ &\quad - 2 \cdot a \cdot \frac{k_1 \cdot k_4 \cdot k_9 \cdot k_{12}}{k_8 \cdot (k_3 \cdot [NO] + k_4 \cdot a)} \cdot \frac{[SO_2]^2}{k_7 \cdot [NO] + k_{12} \cdot [SO_2]} \\ \frac{d[SO_3]}{dt} &= 2 \cdot a \cdot \frac{k_1 \cdot k_4 \cdot k_9}{k_8} \cdot \frac{[SO_2]}{k_3 \cdot [NO] + k_4 \cdot a} - K_{11} \cdot [SO_3] \cdot [H_2O] \\ &\quad + 2 \cdot a \cdot \frac{k_1 \cdot k_4 \cdot k_9 \cdot k_{12}}{k_8 \cdot (k_3 \cdot [NO] + k_4 \cdot a)} \cdot \frac{[SO_2]^2}{k_7 \cdot [NO] + k_{12} \cdot [SO_2]} \\ \frac{d[H_2SO_4]}{dt} &= K_{11} \cdot [SO_3] \cdot [H_2O] \end{aligned} \tag{3.41}$$

Las expresiones planteadas anteriormente pueden simplificarse si se tienen en cuenta las siguientes consideraciones:

- Una vez formado el trióxido de sulfuro SO_3 en la atmósfera reacciona

rápidamente con el vapor de agua presente para formar el ácido sulfúrico H_2SO_4 , que se puede considerar una condición de estado pseudo-estacionario sobre esta especie.

- A partir del análisis de las constantes de equilibrio para toda concentración relevante de NO en la atmósfera podemos considerar que $k_4 \cdot a \gg k_3 \cdot [NO]$.
- La última contribución a la velocidad de formación, tanto del SO_2 como del H_2SO_4 , observamos que va multiplicada por una constante k_{12} , varios órdenes de magnitud inferior al resto de las constantes, de forma que, incluso considerando el valor de $(k_4 \cdot a)$, una vez anulado el efecto de $k_3 \cdot [NO]$ su contribución resulta despreciable frente al resto de los términos que contribuyen a la velocidad de reacción.

Teniendo en cuenta lo anterior, las velocidades de reacción de las diferentes especies involucradas pueden expresarse en la forma siguiente:

$$\frac{d[NO_x]}{dt} = -2 \cdot k_1 \cdot k_8 \cdot [NO_x] \quad (3.42)$$

$$\frac{d[HNO_3]}{dt} = 2 \cdot k_1 \cdot k_8 \cdot [NO_x] \quad (3.43)$$

$$\frac{d[SO_2]}{dt} = -2 \cdot \frac{k_1 \cdot k_9}{k_8} \cdot [SO_2] \quad (3.44)$$

$$\frac{d[H_2SO_4]}{dt} = 2 \cdot \frac{k_1 \cdot k_9}{k_8} \cdot [SO_2] \quad (3.45)$$

Analizando el modelo cinético planteado a la luz de los resultados obtenidos podemos realizar el siguiente análisis cualitativo, (ver figura 3.2): la fotólisis del NO_2 produce NO y $O\cdot$. Estos últimos se combinan casi inmediatamente con moléculas de oxígeno para formar ozono, que reaccionan de forma priori-

taria con el NO para regenerar el NO_2 . Este ciclo representa el ciclo fotoquímico básico, donde el tiempo característico del ciclo de regeneración es tan corto frente a posibles reacciones competidoras que se alcanza una condición de estado estacionario, en la que la concentración de ozono viene determinada en función de la radiación solar incidente. Cuando aparecen especies que compiten con los miembros del equilibrio fotoquímico en la reacción con los radicales libres la situación se modifica en la forma indicada en la figura (3.2).

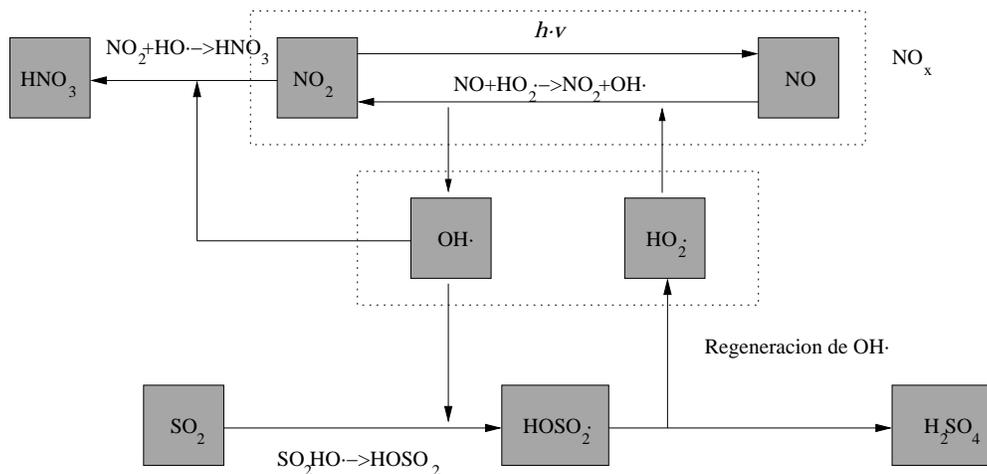


Figura 3.2: Conjunto de reacciones que compiten por los radicales libres $OH\cdot$ y $HO_2\cdot$.

La reacción entre el SO_2 y el $OH\cdot$ es tan lenta como las que tienen lugar en el ciclo fotoquímico del NO , NO_2 y el O_3 , en el que su efecto se traduce en una lenta transformación de NO en NO_2 al aumentar lentamente la concentración de $HO_2\cdot$, responsable de la transformación anterior. Esta reacción regenera radicales $OH\cdot$, que además de realimentar la reacción con el SO_2 , pueden reaccionar con el NO_2 para formar ácido nítrico. Otra posible reacción en que se puede ver involucrada el radical $HO_2\cdot$ es la reacción con el SO_2 para formar en última instancia ácido sulfúrico. Sin embargo, esta reacción es tan lenta que su efecto es mínimo como fuente de oxidación del SO_2 . En realidad esta reacción se ha descrito a nivel cualitativo ya que sus efectos son despreciables.

Para explicar el desacoplamiento de las reacciones de la familia del nitrógeno con las de azufre, a pesar de compartir radicales intermedios en sus reacciones, es necesario volver a las posibles reacciones en las que se ve involucrado el radical $OH\cdot$.

3.2.3. Precipitaciones

Los contaminantes gaseosos sufren absorción por parte del aerosol presente en la atmósfera, así como por las gotas de agua de las nubes. Por ello los hidrometeoros, como la lluvia, contienen una apreciable concentración de contaminantes que pueden ser capturados en su descenso a través de la atmósfera. Cuando estos hidrometeoros alcanzan la superficie terrestre los contaminantes en ellos contenidos son asimilados por la flora y fauna terrestre, así como por el agua de lagos, ríos u océanos. Dicho fenómeno de absorción está caracterizado por la existencia de una velocidad local de eliminación, P_i .

3.2.3.1. Deposición Húmeda

El índice de deposición húmeda se evalúa mediante la siguiente expresión

$$W_g = \int_0^h \Lambda(x, y, z, t) c(x, y, z, t) dz \quad (3.46)$$

donde $\Lambda(x, y, z, t)$ es un coeficiente de lavado y h es la altura de mezcla. Tomando como base W_g se puede definir la velocidad de deposición húmeda como

$$V_w = \frac{W_g}{c(x, y, 0, t)} \quad (3.47)$$

Entonces, si la suma de material removido se distribuye uniformemente a

lo largo de la capa de mezcla, la velocidad de deposición es

$$V_w = \int_0^h \Lambda(z, t) dz = \bar{\Lambda}h \quad (3.48)$$

donde $\bar{\Lambda}$ es un coeficiente promedio de lavado.

Teóricamente la deposición húmeda podría determinarse calculando la cantidad de contaminante eliminada desde la atmósfera cada vez que haya precipitación. En un modelo Euleriano la deposición húmeda se trata como el producto de un coeficiente (que parametriza la transferencia aire-agua) por el de la concentración del contaminante en el aire

$$W_g = v_{wi} I c(x, y, 0, t) \quad (3.49)$$

siendo I la intensidad de precipitación y v_{wi} una proporción de lavado que se define como

$$v_{wi} = \frac{C(aq)}{c(x, y, 0, t)} \quad (3.50)$$

donde $C(aq)$ es la concentración de material en la precipitación en la capa de superficie.

Sin embargo ya que la precipitación solo se mide a nivel de la tierra, se asume normalmente un rango de precipitación constante. Así tenemos que

$$P_i = -\frac{v_{wi}}{h} I c_i \quad (3.51)$$

el término $\frac{v_{wi}}{h}$ se define como un coeficiente de lavado modificado w_h . Si I se da en (m/s) este coeficiente toma los valores típicos representados en la tabla (3.3)

La velocidad de deposición húmeda de la especie i , cuyo valor se puede

Contaminante	Coefficiente de Lavado w_h
SO_2	$6,00 \times 10^{-2}$
SO_4^-	$3,00 \times 10^{-2}$
NO_x	$0,40 \times 10^{-2}$
NO_3^-	$0,39 \times 10^{-2}$

Tabla 3.3: Valores para la deposición húmeda. Por [35]

obtener de la expresión,

$$v_{wi} = w_{ri} p_0 \quad (3.52)$$

siendo w_{ri} la relación entre la concentración de material precipitado y la concentración de material en el aire al nivel de la superficie, y p_0 es la intensidad de precipitación. Los coeficientes de (3.7) serán,

$$\alpha_{ij} = \bar{\alpha}_{ij} \text{ si } j \neq i \quad \text{y} \quad \alpha_{ii} = \bar{\alpha}_{ii} - \frac{v_{wi}}{h} \quad (3.53)$$

3.3. Esquema de Alto Orden en el Tiempo

Siguiendo la metodología desarrollada por Lax y Wendroff [32], se propone una formulación muy general para la ecuación de convección-difusión, que se basa en la combinación de un desarrollo de alto orden en el tiempo, utilizando el desarrollo de Taylor, con la aplicación de la discretización en diferencias finitas. Para una especie i , se realiza un desarrollo temporal en serie de Taylor de c_i

$$c_i^{n+1} = c_i^n + \Delta t \left. \frac{\partial c_i}{\partial t} \right|_n + \frac{\Delta t^2}{2} \left. \frac{\partial^2 c_i}{\partial t^2} \right|_{n+\theta} + O(\Delta t^3) \quad (3.54)$$

donde θ representa un número tal que $0 \leq \theta \leq 1$.

De la ecuación (3.1), la primera derivada del tiempo $\frac{\partial c_i}{\partial t}$ puede ser expresada en términos de derivadas espaciales. La segunda derivada $\frac{\partial^2 c_i}{\partial t^2}$ también puede aproximarse a partir de la derivada parcial temporal de la primera derivada y de la ecuación (3.1).

3.4. Construcción del Sistema de Ecuaciones

Lineales

3.4.1. Ecuaciones correspondientes a los nodos internos

Para los nodos internos del dominio, cuyo número de referencia es cero (ver figura 2.6), intervienen 19 puntos para el primer contaminante $i = 1$ (ver ecuación 3.95), y 26 puntos (ver ecuación 3.133) para la segunda especie contaminante, $i = 2$. Estos puntos se muestran en la figura (3.3).

Considerando $\vec{v} = \vec{v}(x, y, z, t)$ tenemos que

$$c_{i_t}^n = -\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \mathbf{K}_i \nabla^2 c_i^n + f_i \quad (3.55)$$

y su derivada

$$c_{i_{tt}}^n = -\vec{v}_t \cdot \vec{\nabla} c_i^n - \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_{i_t}^n + \mathbf{K}_i \nabla^2 c_{i_t}^n + f_{i_t} \quad (3.56)$$

aplicando desarrollos de Taylor,

$$\begin{aligned} \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} &= -\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \left[c_i^n + \frac{\Delta t}{2} c_{i_t}^n + \frac{\Delta t^2}{6} c_{i_{tt}}^n + O(\Delta t^3) \right] \\ &\quad + \mathbf{K}_i \nabla^2 \left[c_i^n + \frac{\Delta t}{2} c_{i_t}^n + O(\Delta t^2) \right] + f_i \end{aligned} \quad (3.57)$$

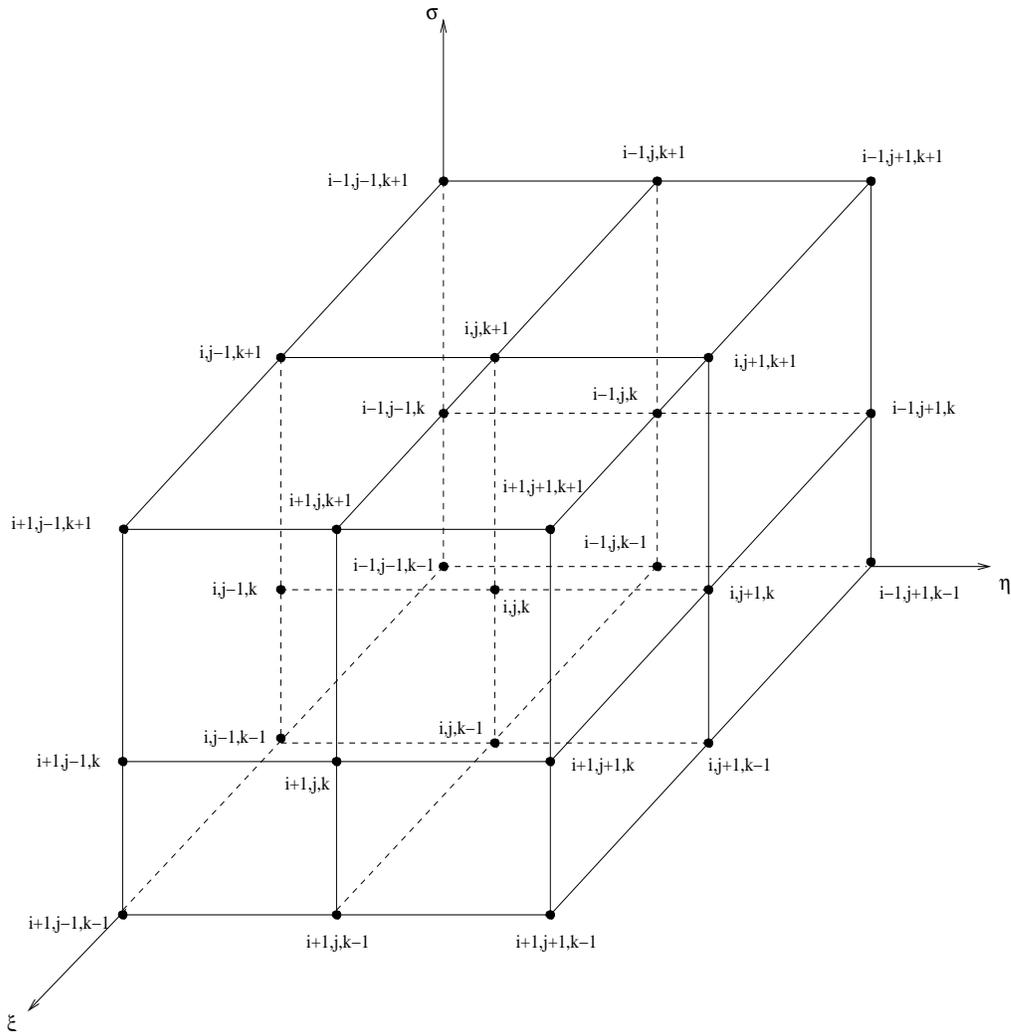


Figura 3.3: Molécula para los nodos internos para la modelización del transporte de contaminantes en la atmósfera

reemplazando la ecuación (3.55) y su derivada (3.56) en (3.57)

$$\begin{aligned}
 \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} &= -\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \left[c_i^n + \frac{\Delta t}{2} \left(-\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \mathbf{K}_i \nabla^2 c_i^n + f_i \right) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\Delta t^2}{6} \left(-\vec{v}_t \cdot \vec{\nabla} c_i^n - \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_{i_t}^n + \mathbf{K}_i \nabla^2 c_{i_t}^n + f_{i_t} \right) + O(\Delta t^3) \right] \\
 &\quad + \mathbf{K}_i \nabla^2 \left[c_i^n + \frac{\Delta t}{2} c_{i_t}^n + O(\Delta t^2) \right] + f_i
 \end{aligned} \tag{3.58}$$

ordenando adecuadamente, y teniendo en cuenta que

$$-\vec{v} \cdot \vec{\nabla} (\mathbf{K}_i \nabla^2 c_i^n) = \mathbf{K}_i \nabla^2 (-\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n) - (\mathbf{K}_i \nabla^2 \vec{v}) \cdot (\vec{\nabla} c_i^n) \quad (3.59)$$

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n) = (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} c_i^n \quad (3.60)$$

tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} &= -\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \frac{\Delta t}{2} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \frac{\Delta t}{2} \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} c_i^n \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_i \nabla^2 (-\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n) - \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{K}_i \nabla^2 \vec{v}) \cdot (\vec{\nabla} c_i^n) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f_i + \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} (\vec{v}_t \cdot \vec{\nabla} c_i^n) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{6} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_{it}^n + \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} c_{it}^n \\ &\quad - \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} (\mathbf{K}_i \nabla^2 c_{it}^n) - \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f_{it} \\ &\quad + \mathbf{K}_i \nabla^2 c_i^n + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_i \nabla^2 c_{it}^n + f_i + O(\Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^2) \end{aligned} \quad (3.61)$$

sustituyendo (3.55) en (3.61), obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} &= -\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \frac{\Delta t}{2} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \frac{\Delta t}{2} \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} c_i^n \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_i \nabla^2 c_{it}^n - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_i \nabla^2 \mathbf{K}_i \nabla^2 c_i^n - \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{K}_i \nabla^2 \vec{v}) \cdot (\vec{\nabla} c_i^n) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f_i + \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} (\vec{v}_t \cdot \vec{\nabla} c_i^n) \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{6} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_{it}^n + \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} c_{it}^n \\ &\quad - \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} (\mathbf{K}_i \nabla^2 c_{it}^n) - \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f_{it} \\ &\quad + \mathbf{K}_i \nabla^2 c_i^n + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_i \nabla^2 c_{it}^n + f_i - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_i \nabla^2 f_i \\ &\quad + O(\Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^2) \end{aligned} \quad (3.62)$$

Reemplazando $c_{i_t}^n = \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t}$ en la ecuación anterior, tenemos

$$\begin{aligned}
\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} &= -\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \frac{\Delta t}{2} \left(\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \right) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \frac{\Delta t}{2} \vec{v} \cdot \left(\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \right) \vec{\nabla} c_i^n \\
&+ \Delta t \mathbf{K}_i \nabla^2 \left(\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} \right) - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_i \nabla^2 \mathbf{K}_i \nabla^2 c_i^n \\
&- \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{K}_i \nabla^2 \vec{v} \right) \cdot \left(\vec{\nabla} c_i^n \right) - \frac{\Delta t}{2} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f_i \\
&+ \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \left(\vec{v}_t \cdot \vec{\nabla} c_i^n \right) \\
&+ \frac{\Delta t^2}{6} \left(\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \right) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} \right) \\
&+ \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \left(\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \right) \vec{\nabla} \left(\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} \right) \\
&- \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \left(\mathbf{K}_i \nabla^2 c_{i_t}^n \right) - \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f_{i_t} \\
&+ \mathbf{K}_i \nabla^2 c_i^n + f_i - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_i \nabla^2 f_i + O(\Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^2) \quad (3.63)
\end{aligned}$$

eliminando derivadas terceras y cuartas, y agrupando correctamente

$$\begin{aligned}
&\left[1 - \frac{\Delta t^2}{6} \left((\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} + \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} \right) - \Delta t \mathbf{K}_i \nabla^2 \right] \left(\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} \right) \\
&= -\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \frac{\Delta t}{2} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \frac{\Delta t}{2} \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} c_i^n \\
&- \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{K}_i \nabla^2 \vec{v} \right) \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \left(\vec{v}_t \cdot \vec{\nabla} c_i^n \right) + \mathbf{K}_i \nabla^2 c_i^n \\
&- \frac{\Delta t}{2} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f_i - \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f_{i_t} + f_i - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_i \nabla^2 f_i \\
&+ O(\Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^2, \|\mathbf{K}_i\|^2 \Delta t) \quad (3.64)
\end{aligned}$$

donde

$$f_i = E_i + \alpha_{i1} c_1^n + \alpha_{i2} c_2^n \quad (3.65)$$

$$\begin{aligned}
 -\frac{\Delta t}{2}\vec{v} \cdot \vec{\nabla} f_i &= -\frac{\Delta t}{2}\vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_i + \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i1} \left(\frac{c_1^{n+1} - c_1^n}{\Delta t} \right) - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i1}\mathbf{K}_i \nabla^2 c_1^n \\
 &\quad - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i1}E_1 - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i1}\alpha_{11}c_1^n - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i1}\alpha_{12}c_2^n \\
 &\quad - \frac{\Delta t^2}{4}\alpha_{i1}\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{c_1^{n+1} - c_1^n}{\Delta t} \right) + \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i2} \left(\frac{c_2^{n+1} - c_2^n}{\Delta t} \right) \\
 &\quad - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i2}\mathbf{K}_i \nabla^2 c_2^n - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i2}E_2 - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i2}\alpha_{21}c_1^n - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i2}\alpha_{22}c_2^n \\
 &\quad - \frac{\Delta t^2}{4}\alpha_{i2}\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{c_2^{n+1} - c_2^n}{\Delta t} \right) + O(\Delta t^3) \tag{3.66}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 -\frac{\Delta t^2}{6}\vec{v} \cdot \vec{\nabla} f_{it} &= -\frac{\Delta t^2}{6}\vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_{it} - \frac{\Delta t^2}{6}\alpha_{i1}\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{c_1^{n+1} - c_1^n}{\Delta t} \right) \\
 &\quad - \frac{\Delta t^2}{6}\alpha_{i2}\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{c_2^{n+1} - c_2^n}{\Delta t} \right) \tag{3.67}
 \end{aligned}$$

Sustituyendo las ecuaciones (3.65),(3.66) y (3.67) en (3.64), la nueva formulación de la ecuación (3.54) resulta finalmente

$$\begin{aligned}
 &\left[1 - \frac{\Delta t^2}{6} \left((\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{v} \cdot \vec{\nabla} + \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{\nabla} \right) - \Delta t\mathbf{K}_i \nabla^2 \right] \left(\frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} \right) \\
 &\quad - \left[\frac{\Delta t}{2}\alpha_{i1} - \frac{5}{12}\Delta t^2\alpha_{i1}\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \right] \left(\frac{c_1^{n+1} - c_1^n}{\Delta t} \right) \\
 &\quad - \left[\frac{\Delta t}{2}\alpha_{i2} - \frac{5}{12}\Delta t^2\alpha_{i2}\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \right] \left(\frac{c_2^{n+1} - c_2^n}{\Delta t} \right) \\
 = &-\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \frac{\Delta t}{2}(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \frac{\Delta t}{2}\vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{\nabla} c_i^n \\
 &\quad - \frac{\Delta t}{2}(\mathbf{K}_i \nabla^2 \vec{v}) \cdot \vec{\nabla} c_i^n + \frac{\Delta t^2}{6}\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \left(\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i^n \right) + \mathbf{K}_i \nabla^2 c_i^n \\
 &\quad - \frac{\Delta t}{2}\vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_i - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i1}\mathbf{K}_i \nabla^2 c_1^n - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i1}E_1 - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i1}\alpha_{11}c_1^n \\
 &\quad - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i1}\alpha_{12}c_2^n - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i2}\mathbf{K}_i \nabla^2 c_2^n - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i2}E_2 - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i2}\alpha_{21}c_1^n \\
 &\quad - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{i2}\alpha_{22}c_2^n - \frac{\Delta t^2}{6}\vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_{it} + E_i + \alpha_{i1}c_1^n + \alpha_{i2}c_2^n - \frac{\Delta t}{2}\mathbf{K}_i \nabla^2 f_i \\
 &\quad + O(\Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^2, \|\mathbf{K}_i\|^2 \Delta t) \tag{3.68}
 \end{aligned}$$

3.4.1.1. Ecuación Correspondiente al Primer Contaminante ($i = 1$)

De la ecuación (3.68), para $i = 1$ resulta

$$\begin{aligned}
& \left[1 - \frac{\Delta t^2}{6} \left((\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} + \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} \right) - \Delta t \mathbf{K}_i \nabla^2 \right. \\
& \left. - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{11} - \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{11} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \right] \left(\frac{c_1^{n+1} - c_1^n}{\Delta t} \right) \\
& - \left[\frac{\Delta t}{2} \alpha_{12} - \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{12} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \right] \left(\frac{c_2^{n+1} - c_2^n}{\Delta t} \right) \\
= & -\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_1^n + \frac{\Delta t}{2} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_1^n + \frac{\Delta t}{2} \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} c_1^n \\
& - \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{K}_i \nabla^2 \vec{v}) \cdot \vec{\nabla} c_1^n + \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} (\vec{v}_t \cdot \vec{\nabla} c_1^n) + \mathbf{K}_i \nabla^2 c_1^n \\
& - \frac{\Delta t}{2} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_1 - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{11} \mathbf{K}_i \nabla^2 c_1^n - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{11} E_1 - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{11}^2 c_1^n \\
& - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{11} \alpha_{12} c_2^n - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{12} \mathbf{K}_i \nabla^2 c_2^n - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{12} E_2 - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{12} \alpha_{21} c_1^n \\
& - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{12} \alpha_{22} c_2^n - \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_{1t} + E_1 + \alpha_{11} c_1^n + \alpha_{12} c_2^n \\
& - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_i \nabla^2 (E_1 + \alpha_{11} c_1^n + \alpha_{12} c_2^n) \\
& + O(\Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^2, \|\mathbf{K}_i\|^2 \Delta t)
\end{aligned} \tag{3.69}$$

con $\alpha_{12} = 0$. Multiplicando por Δt y ordenando adecuadamente tenemos

$$\begin{aligned}
 & c_1^{n+1} - \frac{\Delta t^2}{6} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_1^{n+1} - \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} c_1^{n+1} \\
 & - \Delta t \mathbf{K}_i \nabla^2 c_1^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{11} c_1^{n+1} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{11} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_1^{n+1} \\
 = & c_1^n + \frac{\Delta t^2}{3} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_1^n + \frac{\Delta t^2}{3} \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} c_1^n \\
 & + \frac{\Delta t}{2} \alpha_{11} c_1^n + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{11} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_1^n - \Delta t \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_1^n \\
 & - \frac{\Delta t^2}{2} (\mathbf{K}_i \nabla^2 \vec{v}) \cdot \vec{\nabla} c_1^n + \frac{\Delta t^3}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_1^n) \\
 & - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{11} \mathbf{K}_i \nabla^2 c_1^n - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{11}^2 c_1^n - \frac{\Delta t^2}{2} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_1 \\
 & - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{11} E_1 + \Delta t E_1 - \frac{\Delta t^3}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_{1t} - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_i \nabla^2 E_1 \\
 & - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{11} \mathbf{K}_i \nabla^2 c_1^n + O(\Delta t^4, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\|^2 \Delta t^2)
 \end{aligned} \tag{3.70}$$

Resolviendo algunos gradientes

$$\begin{aligned}
 (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i &= u^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + v^2 \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + w^2 \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + 2uv \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} \\
 & + 2uw \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial z} + 2vw \frac{\partial^2 c}{\partial y \partial z} \\
 & + \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) \frac{\partial c}{\partial x} \\
 & + \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) \frac{\partial c}{\partial y} \\
 & + \left(u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) \frac{\partial c}{\partial z}
 \end{aligned} \tag{3.71}$$

$$\begin{aligned}
 \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} c_i &= u^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + v^2 \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + w^2 \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \\
 & + 2uv \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} + 2uw \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial z} + 2vw \frac{\partial^2 c}{\partial y \partial z}
 \end{aligned} \tag{3.72}$$

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_i = u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} \quad (3.73)$$

$$\nabla^2 c_i = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (3.74)$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{K}_i \nabla^2 \vec{v}) \cdot \vec{\nabla} c_i &= \mathbf{K}_x \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \frac{\partial c}{\partial x} \\ &+ \mathbf{K}_y \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \frac{\partial c}{\partial y} \\ &+ \mathbf{K}_z \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \frac{\partial c}{\partial z} \end{aligned} \quad (3.75)$$

$$\begin{aligned} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} (\vec{v}_t \cdot \vec{\nabla} c_i) &= uu_t \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + vv_t \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + ww_t \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + (uv_t + u_tv) \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial y} \\ &+ (uw_t + u_tw) \frac{\partial^2 c}{\partial x \partial z} + (vw_t + v_tw) \frac{\partial^2 c}{\partial y \partial z} \\ &+ \left(u \frac{\partial u_t}{\partial x} + v \frac{\partial u_t}{\partial y} + w \frac{\partial u_t}{\partial z} \right) \frac{\partial c}{\partial x} \\ &+ \left(u \frac{\partial v_t}{\partial x} + v \frac{\partial v_t}{\partial y} + w \frac{\partial v_t}{\partial z} \right) \frac{\partial c}{\partial y} \\ &+ \left(u \frac{\partial w_t}{\partial x} + v \frac{\partial w_t}{\partial y} + w \frac{\partial w_t}{\partial z} \right) \frac{\partial c}{\partial z} \end{aligned} \quad (3.76)$$

sustituyendo las ecuaciones (3.71), (3.72), (3.73), (3.74), (3.75), y (3.76) en (3.70) y sumando términos semejantes

$$\begin{aligned}
 & \left(1 - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{11}\right) c_1^{n+1} - \left(\frac{\Delta t^2}{3}u^2 + \Delta t\mathbf{K}_x\right) \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial x^2} - \left(\frac{\Delta t^2}{3}v^2 + \Delta t\mathbf{K}_y\right) \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial y^2} \\
 & - \left(\frac{\Delta t^2}{3}w^2 + \Delta t\mathbf{K}_z\right) \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial z^2} - \frac{2}{3}\Delta t^2 uv \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial x \partial y} - \frac{2}{3}\Delta t^2 uw \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial x \partial z} \\
 & - \frac{2}{3}\Delta t^2 vw \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial y \partial z} + \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{5}{12}\Delta t^2 \alpha_{11} u\right) \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial x} \\
 & + \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{5}{12}\Delta t^2 \alpha_{11} v\right) \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial y} \\
 & + \left(u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{5}{12}\Delta t^2 \alpha_{11} w\right) \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial z}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(1 + \frac{\Delta t}{2}\alpha_{11} - \frac{\Delta t^2}{2}\alpha_{11}^2\right) c_1^n + \left(\frac{2}{3}\Delta t^2 u^2 - \Delta t^2 \alpha_{11} \mathbf{K}_x + \frac{\Delta t^3}{6} uu_t\right) \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial x^2} \\
&+ \left(\frac{2}{3}\Delta t^2 v^2 - \Delta t^2 \alpha_{11} \mathbf{K}_y + \frac{\Delta t^3}{6} vv_t\right) \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial y^2} \\
&+ \left(\frac{2}{3}\Delta t^2 w^2 - \Delta t^2 \alpha_{11} \mathbf{K}_z + \frac{\Delta t^3}{6} ww_t\right) \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial z^2} \\
&+ \left[\frac{4}{3}\Delta t^2 uv + \frac{\Delta t^3}{6}(uv_t + u_t v)\right] \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial x \partial y} + \left[\frac{4}{3}\Delta t^2 uw + \frac{\Delta t^3}{6}(uw_t + u_t w)\right] \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial x \partial z} \\
&+ \left[\frac{4}{3}\Delta t^2 vw + \frac{\Delta t^3}{6}(vw_t + v_t w)\right] \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial y \partial z} + \frac{\Delta t^2}{3} \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z}\right) \\
&+ \frac{5}{12}\Delta t^2 \alpha_{11} u - \Delta t u - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_x \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) \\
&+ \frac{\Delta t^3}{6} \left(u \frac{\partial u_t}{\partial x} + v \frac{\partial u_t}{\partial y} + w \frac{\partial u_t}{\partial z}\right) \frac{\partial c_1^n}{\partial x} + \frac{\Delta t^2}{3} \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z}\right) \\
&+ \frac{5}{12}\Delta t^2 \alpha_{11} v - \Delta t v - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_y \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right) \\
&+ \frac{\Delta t^3}{6} \left(u \frac{\partial v_t}{\partial x} + v \frac{\partial v_t}{\partial y} + w \frac{\partial v_t}{\partial z}\right) \frac{\partial c_1^n}{\partial y} + \frac{\Delta t^2}{3} \left(u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z}\right) \\
&+ \frac{5}{12}\Delta t^2 \alpha_{11} w - \Delta t w - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_z \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}\right) \\
&+ \frac{\Delta t^3}{6} \left(u \frac{\partial w_t}{\partial x} + v \frac{\partial w_t}{\partial y} + w \frac{\partial w_t}{\partial z}\right) \frac{\partial c_1^n}{\partial z} - \left(\frac{\Delta t^2}{2}\alpha_{11} - \Delta t\right) E_1 \\
&- \frac{\Delta t^2}{2} \left[u \frac{\partial E_1}{\partial x} + v \frac{\partial E_1}{\partial y} + w \frac{\partial E_1}{\partial z}\right] - \frac{\Delta t^3}{6} \left[u \frac{\partial E_{1t}}{\partial x} + v \frac{\partial E_{1t}}{\partial y} + w \frac{\partial E_{1t}}{\partial z}\right] \\
&- \frac{\Delta t^2}{2} \left[\mathbf{K}_x \frac{\partial^2 E_1}{\partial x^2} + \mathbf{K}_y \frac{\partial^2 E_1}{\partial y^2} + \mathbf{K}_z \frac{\partial^2 E_1}{\partial z^2}\right] \\
&+ O(\Delta t^4, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\|^2 \Delta t^2)
\end{aligned} \tag{3.77}$$

que escrito de una forma más simplificada queda

$$\begin{aligned}
&A_0^1 c_1^{n+1} + A_{11}^1 \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial x^2} + A_{22}^1 \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial y^2} + A_{33}^1 \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial z^2} \\
&+ A_{12}^1 \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial x \partial y} + A_{13}^1 \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial x \partial z} + A_{23}^1 \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial y \partial z} \\
&+ A_1^1 \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial x} + A_2^1 \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial y} + A_3^1 \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial z} \\
&= b^1
\end{aligned} \tag{3.78}$$

Con el cambio de variable a coordenadas conformes tenemos que

$$A_0^1 = 1 - \frac{\Delta t}{2}\alpha_{11} \quad (3.79)$$

$$A_{11}^1 = -\left(\frac{\Delta t^2}{3}u^2 + \Delta t\mathbf{K}_x\right) \quad (3.80)$$

$$A_{22}^1 = -\left(\frac{\Delta t^2}{3}v^2 + \Delta t\mathbf{K}_y\right) \quad (3.81)$$

$$A_{33}^1 = -\left(\frac{\Delta t^2}{3}w^2 + \Delta t\mathbf{K}_z\right) \quad (3.82)$$

$$A_{12}^1 = -\frac{2}{3}\Delta t^2 uv \quad (3.83)$$

$$A_{13}^1 = -\frac{2}{3}\Delta t^2 uw \quad (3.84)$$

$$A_{23}^1 = -\frac{2}{3}\Delta t^2 vw \quad (3.85)$$

$$A_1^1 = u\frac{1}{x_l}\frac{\partial u}{\partial \xi} + v\frac{1}{y_l}\frac{\partial u}{\partial \eta} + \left[\left(\frac{\sigma-1}{\pi}\right)\left(u\frac{\partial z_s}{\partial x} + v\frac{\partial z_s}{\partial y}\right) + \frac{1}{\pi}w\right]\frac{\partial u}{\partial \sigma} + \frac{5}{12}\Delta t^2\alpha_{11}u \quad (3.86)$$

$$A_2^1 = u\frac{1}{x_l}\frac{\partial v}{\partial \xi} + v\frac{1}{y_l}\frac{\partial v}{\partial \eta} + \left[\left(\frac{\sigma-1}{\pi}\right)\left(u\frac{\partial z_s}{\partial x} + v\frac{\partial z_s}{\partial y}\right) + \frac{1}{\pi}w\right]\frac{\partial v}{\partial \sigma} + \frac{5}{12}\Delta t^2\alpha_{11}v \quad (3.87)$$

$$A_3^1 = u\frac{1}{x_l}\frac{\partial w}{\partial \xi} + v\frac{1}{y_l}\frac{\partial w}{\partial \eta} + \left[\left(\frac{\sigma-1}{\pi}\right)\left(u\frac{\partial z_s}{\partial x} + v\frac{\partial z_s}{\partial y}\right) + \frac{1}{\pi}w\right]\frac{\partial w}{\partial \sigma} + \frac{5}{12}\Delta t^2\alpha_{11}w \quad (3.88)$$

Aplicando el cambio de variable a la ecuacion (3.78)

$$\begin{aligned}
& A_0^1 c_1^{n+1} + A_{11}^1 \frac{1}{x_l^2} \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial \xi^2} + A_{22}^1 \frac{1}{y_l^2} \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial \eta^2} \\
& + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \left(A_{11}^1 \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + A_{22}^1 \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + A_{12}^1 \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + A_{33}^1 \frac{1}{\pi^2} \right. \\
& + \left. \left(\frac{\sigma - 1}{\pi^2} \right) \left(A_{13}^1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_{23}^1 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \right] \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial \sigma^2} + A_{12}^1 \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial \xi \partial \eta} \\
& + \left[\frac{1}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(2A_{11}^1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_{12}^1 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + A_{13}^1 \frac{1}{\pi} \frac{1}{x_l} \right] \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial \xi \partial \sigma} \\
& + \left[\frac{1}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(2A_{22}^1 \frac{\partial z_s}{\partial y} + A_{12}^1 \frac{\partial z_s}{\partial x} \right) + A_{23}^1 \frac{1}{\pi} \frac{1}{y_l} \right] \frac{\partial^2 c_1^{n+1}}{\partial \eta \partial \sigma} \\
& + A_1^1 \frac{1}{x_l} \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial \xi} + A_2^1 \frac{1}{y_l} \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial \eta} + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(A_{11}^1 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + A_{22}^1 \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + A_{12}^1 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x \partial y} \right. \right. \\
& + A_1^1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_2^1 \frac{\partial z_s}{\partial y} + A_{11}^1 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + A_{22}^1 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + A_{12}^1 \frac{2}{\pi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} \left. \right) \\
& + \left. \frac{1}{\pi^2} \left(A_{13}^1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_{23}^1 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + A_3^1 \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial \sigma} \\
& = b^1 \tag{3.89}
\end{aligned}$$

Aplicando los esquemas en diferencias finitas obtenidos en el capítulo anterior

$$\begin{aligned}
& A_0^1 c_{1i,j,k}^{n+1} + A_{11}^1 \frac{1}{x_l^2} \left(\frac{c_{1i-1,j,k}^{n+1} - 2c_{1i,j,k}^{n+1} + c_{1i+1,j,k}^{n+1}}{\Delta \xi^2} \right) \\
& + A_{22}^1 \frac{1}{y_l^2} \left(\frac{c_{1i,j-1,k}^{n+1} - 2c_{1i,j,k}^{n+1} + c_{1i,j+1,k}^{n+1}}{\Delta \eta^2} \right) \\
& + M_1^1 \left(\frac{2c_{1i,j,k-1}^{n+1} - (1 + \lambda_k) c_{1i,j,k}^{n+1} + \lambda_k c_{1i,j,k+1}^{n+1}}{\Delta \sigma_k^{+2} (\lambda_k + \lambda_k^2)} \right) \\
& + A_{12}^1 \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \left(\frac{c_{1i+1,j+1,k}^{n+1} - c_{1i-1,j+1,k}^{n+1} - c_{1i+1,j-1,k}^{n+1} + c_{1i-1,j-1,k}^{n+1}}{4\Delta \xi \Delta \eta} \right) \\
& + M_2^1 \left(\frac{\lambda_k^2 c_{1i+1,j,k+1}^{n+1} - \lambda_k^2 c_{1i-1,j,k+1}^{n+1} - c_{1i+1,j,k-1}^{n+1} + c_{1i-1,j,k-1}^{n+1}}{2\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \xi} \right) \\
& + \frac{(\lambda_k^2 - 1) c_{1i-1,j,k}^{n+1} - (\lambda_k^2 - 1) c_{1i+1,j,k}^{n+1}}{2\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \xi} \\
& + M_3^1 \left(\frac{\lambda_k^2 c_{1i,j+1,k+1}^{n+1} - \lambda_k^2 c_{1i,j-1,k+1}^{n+1} - c_{1i,j+1,k-1}^{n+1} + c_{1i,j-1,k-1}^{n+1}}{2\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \eta} \right) \\
& + \frac{(\lambda_k^2 - 1) c_{1i,j-1,k}^{n+1} - (\lambda_k^2 - 1) c_{1i,j+1,k}^{n+1}}{2\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \eta} \\
& + A_1^1 \frac{1}{x_l} \left(\frac{c_{1i+1,j,k}^{n+1} - c_{1i-1,j,k}^{n+1}}{2\Delta \xi} \right) + A_2^1 \frac{1}{y_l} \left(\frac{c_{1i,j+1,k}^{n+1} - c_{1i,j-1,k}^{n+1}}{2\Delta \eta} \right) \\
& + M_4^1 \left(\frac{\lambda_k^2 c_{1i,j,k+1}^{n+1} - (\lambda_k^2 - 1) c_{1i,j,k}^{n+1} - c_{1i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2)} \right) \\
& = b^1
\end{aligned} \tag{3.90}$$

donde

$$M_1^1 = \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \left(A_{11}^1 \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + A_{22}^1 \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + A_{12}^1 \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + A_{33}^1 \frac{1}{\pi^2} + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi^2} \right) \left(A_{13}^1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_{23}^1 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \quad (3.91)$$

$$M_2^1 = \frac{1}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(2A_{11}^1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_{12}^1 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + A_{13}^1 \frac{1}{\pi} \frac{1}{x_l} \quad (3.92)$$

$$M_3^1 = \frac{1}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(2A_{22}^1 \frac{\partial z_s}{\partial y} + A_{12}^1 \frac{\partial z_s}{\partial x} \right) + A_{23}^1 \frac{1}{\pi} \frac{1}{y_l} \quad (3.93)$$

$$M_4^1 = \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(A_{11}^1 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + A_{22}^1 \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + A_{12}^1 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x \partial y} + A_1^1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_2^1 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + A_{11}^1 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + A_{22}^1 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + A_{12}^1 \frac{2}{\pi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} + \frac{1}{\pi^2} \left(A_{13}^1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_{23}^1 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + A_3^1 \frac{1}{\pi} \quad (3.94)$$

Agrupando por nodos

$$\begin{aligned}
& M_3^1 \frac{1}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta\eta} c_{1i,j-1,k-1}^{n+1} + M_2^1 \frac{1}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta\xi} c_{1i-1,j,k-1}^{n+1} \\
& \left[M_1^1 \frac{2}{\Delta\sigma_k^{+2} (\lambda_k + \lambda_k^2)} - M_4^1 \frac{1}{\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2)} \right] c_{1i,j,k-1}^{n+1} \\
& - M_2^1 \frac{1}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta\xi} c_{1i+1,j,k-1}^{n+1} - M_3^1 \frac{1}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta\eta} c_{1i,j+1,k-1}^{n+1} \\
& + A_{12}^1 \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \frac{1}{4\Delta\xi\Delta\eta} c_{1i-1,j-1,k}^{n+1} \\
& + \left[A_{22}^1 \frac{1}{y_l^2} \frac{1}{\Delta\eta^2} + M_3^1 \frac{\lambda_k - 1}{2\Delta\sigma_k^+ \lambda_k \Delta\eta} - A_2^1 \frac{1}{y_l} \frac{1}{2\Delta\eta} \right] c_{1i,j-1,k}^{n+1} \\
& - A_{12}^1 \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \frac{1}{4\Delta\xi\Delta\eta} c_{1i+1,j-1,k}^{n+1} \\
& + \left[A_{11}^1 \frac{1}{x_l^2} \frac{1}{\Delta\xi^2} + M_2^1 \frac{\lambda_k - 1}{2\Delta\sigma_k^+ \lambda_k \Delta\xi} - A_1^1 \frac{1}{x_l} \frac{1}{2\Delta\xi} \right] c_{1i-1,j,k}^{n+1} \\
& - \left[A_{11}^1 \frac{1}{x_l^2} \frac{2}{\Delta\xi^2} + A_{22}^1 \frac{1}{y_l^2} \frac{2}{\Delta\eta^2} + M_1^1 \frac{2}{\Delta\sigma_k^{+2} \lambda_k} + M_4^1 \frac{\lambda_k - 1}{\Delta\sigma_k^+ \lambda_k} - A_0^1 \right] c_{1i,j,k}^{n+1} \\
& + \left[A_{11}^1 \frac{1}{x_l^2} \frac{1}{\Delta\xi^2} - M_2^1 \frac{\lambda_k - 1}{2\Delta\sigma_k^+ \lambda_k \Delta\xi} + A_1^1 \frac{1}{x_l} \frac{1}{2\Delta\xi} \right] c_{1i+1,j,k}^{n+1} \\
& - A_{12}^1 \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \frac{1}{4\Delta\xi\Delta\eta} c_{1i-1,j+1,k}^{n+1} \\
& + \left[A_{22}^1 \frac{1}{y_l^2} \frac{1}{\Delta\eta^2} - M_3^1 \frac{\lambda_k - 1}{2\Delta\sigma_k^+ \lambda_k \Delta\eta} + A_2^1 \frac{1}{y_l} \frac{1}{2\Delta\eta} \right] c_{1i,j+1,k}^{n+1} \\
& + A_{12}^1 \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \frac{1}{4\Delta\xi\Delta\eta} c_{1i+1,j+1,k}^{n+1} \\
& - M_3^1 \frac{\lambda_k}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + 1) \Delta\eta} c_{1i,j-1,k+1}^{n+1} - M_2^1 \frac{\lambda_k}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + 1) \Delta\xi} c_{1i-1,j,k+1}^{n+1} \\
& + \left[M_1^1 \frac{2}{\Delta\sigma_k^{+2} (\lambda_k + 1)} + M_4^1 \frac{\lambda_k}{\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + 1)} \right] c_{1i,j,k+1}^{n+1} \\
& + M_2^1 \frac{\lambda_k}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + 1) \Delta\xi} c_{1i+1,j,k+1}^{n+1} + M_3^1 \frac{\lambda_k}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + 1) \Delta\eta} c_{1i,j+1,k+1}^{n+1} \\
& = b^1 \tag{3.95}
\end{aligned}$$

para el segundo miembro con el cambio de variable queda

$$\begin{aligned}
b^1 = & a_1 c_1^n + b_1 \frac{1}{x_l^2} \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial \xi^2} + c_1 \frac{1}{y_l^2} \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial \eta^2} + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \left(b_1 \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + c_1 \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right. \right. \\
& + e_1 \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} \left. \left. \right) + d_1 \frac{1}{\pi^2} + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi^2} \right) \left(f_1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + g_1 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial \sigma^2} \right. \\
& + e_1 \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial \xi \partial \eta} \\
& + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(b_1 \frac{2}{x_l} \frac{\partial z_s}{\partial x} + e_1 \frac{1}{x_l} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + f_1 \frac{1}{x_l} \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial \xi \partial \sigma} \\
& + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(c_1 \frac{2}{y_l} \frac{\partial z_s}{\partial y} + e_1 \frac{1}{y_l} \frac{\partial z_s}{\partial x} \right) + g_1 \frac{1}{y_l} \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial \eta \partial \sigma} \\
& + h_1 \frac{1}{x_l} \frac{\partial c_1^n}{\partial \xi} + i_1 \frac{1}{y_l} \frac{\partial c_1^n}{\partial \eta} \\
& + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(b_1 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + b_1 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + c_1 \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + c_1 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + e_1 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x \partial y} \right. \right. \\
& + e_1 \frac{2}{\pi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} + h_1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + i_1 \frac{\partial z_s}{\partial y} \left. \left. \right) + \frac{1}{\pi^2} \left(f_1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + g_1 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + j_1 \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial c_1^n}{\partial \sigma} \\
& - \frac{\Delta t^2}{2} \left[u \frac{\partial E_1}{\partial x} + v \frac{\partial E_1}{\partial y} + w \frac{\partial E_1}{\partial z} \right] - \left(\frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{11} - \Delta t \right) E_1 \\
& - \frac{\Delta t^3}{6} \left[u \frac{\partial E_{1t}}{\partial x} + v \frac{\partial E_{1t}}{\partial y} + w \frac{\partial E_{1t}}{\partial z} \right] - \frac{\Delta t^2}{2} \left[\mathbf{K}_x \frac{\partial^2 E_1}{\partial x^2} + \mathbf{K}_y \frac{\partial^2 E_1}{\partial y^2} + \mathbf{K}_z \frac{\partial^2 E_1}{\partial z^2} \right] \\
& + O(\Delta t^4, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\|^2 \Delta t^2) \tag{3.96}
\end{aligned}$$

donde

$$a_1 = 1 + \frac{\Delta t}{2}\alpha_{11} - \frac{\Delta t^2}{2}\alpha_{11}^2 \quad (3.97)$$

$$b_1 = \frac{2}{3}\Delta t^2 u^2 - \Delta t^2 \alpha_{11} \mathbf{K}_x + \frac{\Delta t^3}{6} u u_t \quad (3.98)$$

$$c_1 = \frac{2}{3}\Delta t^2 v^2 - \Delta t^2 \alpha_{11} \mathbf{K}_y + \frac{\Delta t^3}{6} v v_t \quad (3.99)$$

$$d_1 = \frac{2}{3}\Delta t^2 w^2 - \Delta t^2 \alpha_{11} \mathbf{K}_z + \frac{\Delta t^3}{6} w w_t \quad (3.100)$$

$$e_1 = \frac{4}{3}\Delta t^2 uv + \frac{\Delta t^3}{6} (u v_t + u_t v) \quad (3.101)$$

$$f_1 = \frac{4}{3}\Delta t^2 uw + \frac{\Delta t^3}{6} (u w_t + u_t w) \quad (3.102)$$

$$g_1 = \frac{4}{3}\Delta t^2 vw + \frac{\Delta t^3}{6} (v w_t + v_t w) \quad (3.103)$$

$$\begin{aligned} h_1 = & 6 - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_x \frac{1}{x_l^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_x \frac{1}{y_l^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} - \left[\frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_x \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \right. \\ & \left. \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_x \frac{1}{\pi^2} \right] \frac{\partial^2 u}{\partial \sigma^2} \\ & - \Delta t^2 \mathbf{K}_x \frac{1}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \sigma} - \Delta t^2 \mathbf{K}_x \frac{1}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y} \frac{\partial^2 u}{\partial \eta \partial \sigma} \\ & + \frac{\Delta t^2}{3} u \frac{1}{x_l} \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{\Delta t^2}{3} v \frac{1}{y_l} \frac{\partial u}{\partial \eta} + \left[\frac{\Delta t^2}{3} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \right. \\ & \left. + \frac{\Delta t^2}{3} w \frac{1}{\pi} - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_x \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(\frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) \right] \frac{\partial u}{\partial \sigma} + \frac{\Delta t^3}{6} u \frac{1}{x_l} \frac{\partial u_t}{\partial \xi} + \frac{\Delta t^3}{6} v \frac{1}{y_l} \frac{\partial u_t}{\partial \eta} \\ & + \frac{\Delta t^3}{6} \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + w \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial u_t}{\partial \sigma} \\ & + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{11} u - \Delta t u \end{aligned} \quad (3.104)$$

$$\begin{aligned}
i_1 = & -\frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_y \frac{1}{x_l^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_y \frac{1}{y_l^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_y \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) \right. \\
& + \left. \frac{1}{\pi^2} \right] \frac{\partial^2 v}{\partial \sigma^2} - \Delta t^2 \mathbf{K}_y \frac{1}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \sigma} \\
& - \Delta t^2 \mathbf{K}_y \frac{1}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y} \frac{\partial^2 v}{\partial \eta \partial \sigma} + \frac{\Delta t^2}{3} u \frac{1}{x_l} \frac{\partial v}{\partial \xi} + \frac{\Delta t^2}{3} v \frac{1}{y_l} \frac{\partial v}{\partial \eta} \\
& + \left[\frac{\Delta t^2}{3} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{\Delta t^2}{3} w \frac{1}{\pi} \right. \\
& - \left. \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_y \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(\frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) \right] \frac{\partial v}{\partial \sigma} \\
& + \frac{\Delta t^3}{6} u \frac{1}{x_l} \frac{\partial v_t}{\partial \xi} + \frac{\Delta t^3}{6} v \frac{1}{y_l} \frac{\partial v_t}{\partial \eta} \\
& + \frac{\Delta t^3}{6} \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + w \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial v_t}{\partial \sigma} \\
& + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{11} v - \Delta t v
\end{aligned} \tag{3.105}$$

$$\begin{aligned}
j_1 = & -\frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_z \frac{1}{x_l^2} \frac{\partial^2 w}{\partial \xi^2} - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_z \frac{1}{y_l^2} \frac{\partial^2 w}{\partial \eta^2} - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_z \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) \right. \\
& + \left. \frac{1}{\pi^2} \right] \frac{\partial^2 w}{\partial \sigma^2} - \Delta t^2 \mathbf{K}_z \frac{1}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial^2 w}{\partial \xi \partial \sigma} \\
& + \Delta t^2 \mathbf{K}_z \frac{1}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y} \frac{\partial^2 w}{\partial \eta \partial \sigma} + \frac{\Delta t^2}{3} u \frac{1}{x_l} \frac{\partial w}{\partial \xi} + \frac{\Delta t^2}{3} v \frac{1}{y_l} \frac{\partial w}{\partial \eta} \\
& + \left[\frac{\Delta t^2}{3} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{\Delta t^2}{3} w \frac{1}{\pi} \right. \\
& - \left. \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_z \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(\frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) \right] \frac{\partial w}{\partial \sigma} \\
& + \frac{\Delta t^3}{6} u \frac{1}{x_l} \frac{\partial w_t}{\partial \xi} + \frac{\Delta t^3}{6} v \frac{1}{y_l} \frac{\partial w_t}{\partial \eta} \\
& + \frac{\Delta t^3}{6} \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + w \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial w_t}{\partial \sigma} \\
& + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{11} w - \Delta t w
\end{aligned} \tag{3.106}$$

Con los esquemas en diferencias finitas

$$\begin{aligned}
b^1 = & a_1 c_1^n + b_1 \frac{1}{x_l^2} \left(\frac{c_{1i-1,j,k}^n - 2c_{1i,j,k}^n + c_{1i+1,j,k}^n}{\Delta \xi^2} \right) \\
& + c_1 \frac{1}{y_l^2} \left(\frac{c_{1i,j-1,k}^n - 2c_{1i,j,k}^n + c_{1i,j+1,k}^n}{\Delta \eta^2} \right) \\
& + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \left(b_1 \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + c_1 \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + e_1 \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + d_1 \frac{1}{\pi^2} \right. \\
& + \left. \left(\frac{\sigma - 1}{\pi^2} \right) \left(f_1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + g_1 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \right] \left(\frac{2c_{1i,j,k-1}^n - (1 - \lambda_k) c_{1i,j,k}^n + \lambda_k c_{1i,j,k+1}^n}{\Delta \sigma_k^{+2} (\lambda_k + \lambda_k^2)} \right) \\
& + e_1 \frac{1}{x_l y_l} \left(\frac{c_{1i+1,j+1,k}^n - c_{1i-1,j+1,k}^n - c_{1i+1,j-1,k}^n + c_{1i-1,j-1,k}^n}{4\Delta \xi \Delta \eta} \right) \\
& + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(b_1 \frac{2}{x_l} \frac{\partial z_s}{\partial x} + e_1 \frac{1}{x_l} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + f_1 \frac{1}{x_l} \frac{1}{\pi} \right] \left(\frac{\lambda_k^2 c_{1i+1,j,k+1}^n - \lambda_k^2 c_{1i-1,j,k+1}^n}{2\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \xi} \right. \\
& \left. - \frac{c_{1i+1,j,k-1}^n + c_{1i-1,j,k-1}^n + (\lambda_k^2 - 1) c_{1i-1,j,k}^n - (\lambda_k^2 - 1) c_{1i+1,j,k}^n}{2\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \xi} \right) \\
& + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(c_1 \frac{2}{y_l} \frac{\partial z_s}{\partial y} + e_1 \frac{1}{y_l} \frac{\partial z_s}{\partial x} \right) + g_1 \frac{1}{y_l} \frac{1}{\pi} \right] \left(\frac{\lambda_k^2 c_{1i,j+1,k+1}^n - \lambda_k^2 c_{1i,j-1,k+1}^n}{2\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \eta} \right. \\
& \left. - \frac{c_{1i,j+1,k-1}^n + c_{1i,j-1,k-1}^n + (\lambda_k^2 - 1) c_{1i,j-1,k}^n - (\lambda_k^2 - 1) c_{1i,j+1,k}^n}{2\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \eta} \right) \\
& + h_1 \frac{1}{x_l} \left(\frac{c_{1i+1,j,k}^n - c_{1i-1,j,k}^n}{2\Delta \xi} \right) + i_1 \frac{1}{y_l} \left(\frac{c_{1i,j+1,k}^n - c_{1i,j-1,k}^n}{2\Delta \eta} \right) \\
& + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(b_1 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + b_1 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + c_1 \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + c_1 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + e_1 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x \partial y} \right. \right. \\
& \left. \left. + e_1 \frac{2}{\pi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} + h_1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + i_1 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{1}{\pi^2} \left(f_1 \frac{\partial z_s}{\partial x} + g_1 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + j_1 \frac{1}{\pi} \right] \\
& \left(\frac{\lambda_k^2 c_{1i,j,k+1}^n - (\lambda_k^2 - 1) c_{1i,j,k}^n - c_{1i,j,k-1}^n}{\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2)} \right) - \frac{\Delta t^2}{2} \left[u \frac{\partial E_1}{\partial x} + v \frac{\partial E_1}{\partial y} + w \frac{\partial E_1}{\partial z} \right] \\
& - \left(\frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{11} - \Delta t \right) E_1 - \frac{\Delta t^3}{6} \left[u \frac{\partial E_{1t}}{\partial x} + v \frac{\partial E_{1t}}{\partial y} + w \frac{\partial E_{1t}}{\partial z} \right] \\
& - \frac{\Delta t^2}{2} \left[\mathbf{K}_x \frac{\partial^2 E_1}{\partial x^2} + \mathbf{K}_y \frac{\partial^2 E_1}{\partial y^2} + \mathbf{K}_z \frac{\partial^2 E_1}{\partial z^2} \right] \\
& + O(\Delta t^4, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\|^2 \Delta t^2)
\end{aligned} \tag{3.107}$$

3.4.1.2. Ecuación Correspondiente al Segundo Contaminante ($i = 2$)

De la ecuación (3.68), para $i = 2$ tenemos

$$\begin{aligned}
& \left[1 - \frac{\Delta t^2}{6} \left((\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} + \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} \right) - \Delta t \mathbf{K}_i \nabla^2 - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{22} \right. \\
& \quad \left. - \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{22} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \right] \left(\frac{c_2^{n+1} - c_2^n}{\Delta t} \right) \\
& \quad - \left[\frac{\Delta t}{2} \alpha_{21} - \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{21} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \right] \left(\frac{c_1^{n+1} - c_1^n}{\Delta t} \right) \\
= & -\vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_2^n + \frac{\Delta t}{2} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_2^n + \frac{\Delta t}{2} \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} c_2^n \\
& - \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{K}_i \nabla^2 \vec{v}) \cdot \vec{\nabla} c_2^n + \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} (\vec{v}_t \cdot \vec{\nabla} c_2^n) + \mathbf{K}_i \nabla^2 c_2^n \\
& - \frac{\Delta t}{2} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_2 - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{21} \mathbf{K}_i \nabla^2 c_1^n - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{21} E_1 - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{21} \alpha_{11} c_1^n \\
& - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{21} \alpha_{12} c_2^n - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{22} \mathbf{K}_i \nabla^2 c_2^n - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{22} E_2 - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{22} \alpha_{21} c_1^n \\
& - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{22}^2 c_2^n - \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_{2t} + E_2 + \alpha_{21} c_1^n + \alpha_{22} c_2^n \\
& - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{K}_i \nabla^2 (E_2 + \alpha_{21} c_1^n + \alpha_{22} c_2^n) \\
& + O(\Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^2, \|\mathbf{K}_i\|^2 \Delta t)
\end{aligned} \tag{3.108}$$

con $\alpha_{12} = 0$ Multiplicando por Δt tenemos

$$\begin{aligned}
& c_2^{n+1} - \frac{\Delta t^2}{6} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_2^{n+1} - \frac{\Delta t^2}{6} \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} c_2^{n+1} - \Delta t \mathbf{K}_i \nabla^2 c_2^{n+1} \\
& - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{22} c_2^{n+1} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{22} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_2^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{21} c_2^{n+1} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{21} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_1^{n+1} \\
= & c_2^n + \frac{\Delta t^2}{3} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_2^n + \frac{\Delta t^2}{3} \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\nabla} c_2^n + \frac{\Delta t}{2} \alpha_{22} c_2^n \\
& + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{22} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_2^n - \Delta t \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_2^n - \frac{\Delta t^2}{2} (\mathbf{K}_i \nabla^2 \vec{v}) \cdot \nabla c_2^n \\
& + \frac{\Delta t^3}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} (\vec{v}_t \cdot \vec{\nabla} c_2^n) - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{22} \mathbf{K}_i \nabla^2 c_2^n - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{22}^2 c_2^n \\
& - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{21} c_1^n + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{21} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_1^n - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{21} \mathbf{K}_i \nabla^2 c_1^n \\
& - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{21} \alpha_{11} c_1^n - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{22} \alpha_{21} c_1^n + \Delta t \alpha_{21} c_1^n - \frac{\Delta t^2}{2} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_2 \\
& - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{22} E_2 + \Delta t E_2 - \frac{\Delta t^3}{6} \vec{v} \cdot \vec{\nabla} E_{2t} - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{21} E_1 \\
& - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_i \nabla^2 E_2 - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{21} \mathbf{K}_i \nabla^2 c_1^n - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{22} \mathbf{K}_i \nabla^2 c_2^n \\
& + O(\Delta t^4, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\|^2 \Delta t^2)
\end{aligned} \tag{3.109}$$

Sustituyendo las ecuaciones (3.71) a (3.76) en (3.109) y agrupando correctamente

$$\begin{aligned}
& \left(1 - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{22}\right) c_2^{n+1} - \left(\frac{\Delta t^2}{3} u^2 + \Delta t \mathbf{K}_x\right) \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial x^2} - \left(\frac{\Delta t^2}{3} v^2 + \Delta t \mathbf{K}_y\right) \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial y^2} \\
& - \left(\frac{\Delta t^2}{3} w^2 + \Delta t \mathbf{K}_z\right) \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial z^2} - \frac{2}{3} \Delta t^2 uv \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial x \partial y} - \frac{2}{3} \Delta t^2 uw \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial x \partial z} \\
& - \frac{2}{3} \Delta t^2 vw \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial y \partial z} + \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{22} u\right) \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial x} \\
& + \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{22} v\right) \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial y} \\
& + \left(u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{22} w\right) \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial z} \\
& - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{21} c_1^{n+1} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{21} u \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial x} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{21} v \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial y} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{21} w \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial z}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(1 + \frac{\Delta t}{2}\alpha_{22} - \frac{\Delta t^2}{2}\alpha_{22}^2\right) c_2^n + \left(\frac{2}{3}\Delta t^2 u^2 - \Delta t^2 \alpha_{22} \mathbf{K}_x + \frac{\Delta t^3}{6} uu_t\right) \frac{\partial^2 c_2^n}{\partial x^2} \\
&+ \left(\frac{2}{3}\Delta t^2 v^2 - \Delta t^2 \alpha_{22} \mathbf{K}_y + \frac{\Delta t^3}{6} vv_t\right) \frac{\partial^2 c_2^n}{\partial y^2} \\
&+ \left(\frac{2}{3}\Delta t^2 w^2 - \Delta t^2 \alpha_{22} \mathbf{K}_z + \frac{\Delta t^3}{6} ww_t\right) \frac{\partial^2 c_2^n}{\partial z^2} \\
&+ \left[\frac{4}{3}\Delta t^2 uv + \frac{\Delta t^3}{6}(uv_t + u_tv)\right] \frac{\partial^2 c_2^n}{\partial x \partial y} + \left[\frac{4}{3}\Delta t^2 uw + \frac{\Delta t^3}{6}(uw_t + u_tw)\right] \frac{\partial^2 c_2^n}{\partial x \partial z} \\
&+ \left[\frac{4}{3}\Delta t^2 vw + \frac{\Delta t^3}{6}(vw_t + v_tw)\right] \frac{\partial^2 c_2^n}{\partial y \partial z} + \left[\frac{\Delta t^2}{3}\left(u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + w\frac{\partial u}{\partial z}\right)\right. \\
&+ \frac{5}{12}\Delta t^2 \alpha_{22} u - \Delta t u - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_x \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) \\
&+ \left.\frac{\Delta t^3}{6}\left(u\frac{\partial u_t}{\partial x} + v\frac{\partial u_t}{\partial y} + w\frac{\partial u_t}{\partial z}\right)\right] \frac{\partial c_2^n}{\partial x} + \left[\frac{\Delta t^2}{3}\left(u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + w\frac{\partial v}{\partial z}\right)\right. \\
&+ \frac{5}{12}\Delta t^2 \alpha_{22} v - \Delta t v - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_y \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right) \\
&+ \left.\frac{\Delta t^3}{6}\left(u\frac{\partial v_t}{\partial x} + v\frac{\partial v_t}{\partial y} + w\frac{\partial v_t}{\partial z}\right)\right] \frac{\partial c_2^n}{\partial y} + \left[\frac{\Delta t^2}{3}\left(u\frac{\partial w}{\partial x} + v\frac{\partial w}{\partial y} + w\frac{\partial w}{\partial z}\right)\right. \\
&+ \frac{5}{12}\Delta t^2 \alpha_{22} w - \Delta t w - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_z \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}\right) \\
&+ \left.\frac{\Delta t^3}{6}\left(u\frac{\partial w_t}{\partial x} + v\frac{\partial w_t}{\partial y} + w\frac{\partial w_t}{\partial z}\right)\right] \frac{\partial c_2^n}{\partial z} - \left[\frac{\Delta t^2}{2}\alpha_{21}(1 + \alpha_{11} + \alpha_{22}) - \Delta t \alpha_{21}\right] c_1^n \\
&- \Delta t^2 \alpha_{21} \mathbf{K}_x \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial x^2} - \Delta t^2 \alpha_{21} \mathbf{K}_y \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial y^2} - \Delta t^2 \alpha_{21} \mathbf{K}_z \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial z^2} + \frac{5}{12}\Delta t^2 \alpha_{21} u \frac{\partial c_1^n}{\partial x} \\
&+ \frac{5}{12}\Delta t^2 \alpha_{21} v \frac{\partial c_1^n}{\partial y} + \frac{5}{12}\Delta t^2 \alpha_{21} w \frac{\partial c_1^n}{\partial z} - \left(\frac{\Delta t^2}{2}\alpha_{22} - \Delta t\right) E_2 \\
&- \frac{\Delta t^2}{2}\left[u\frac{\partial E_2}{\partial x} + v\frac{\partial E_2}{\partial y} + w\frac{\partial E_2}{\partial z}\right] - \frac{\Delta t^3}{6}\left[u\frac{\partial E_{2t}}{\partial x} + v\frac{\partial E_{2t}}{\partial y} + w\frac{\partial E_{2t}}{\partial z}\right] \\
&- \frac{\Delta t^2}{2}\alpha_{21} E_1 - \frac{\Delta t^2}{2}\left[\mathbf{K}_x \frac{\partial^2 E_2}{\partial x^2} + \mathbf{K}_y \frac{\partial^2 E_2}{\partial y^2} + \mathbf{K}_z \frac{\partial^2 E_2}{\partial z^2}\right] \\
&+ O(\Delta t^4, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\|^2 \Delta t^2)
\end{aligned} \tag{3.110}$$

que escrito de una forma mas simplificada sería

$$\begin{aligned}
 & A_0^2 c_2^{n+1} + A_{11}^2 \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial x^2} + A_{22}^2 \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial y^2} + A_{33}^2 \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial z^2} \\
 & + A_{12}^2 \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial x \partial y} + A_{13}^2 \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial x \partial z} + A_{23}^2 \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial y \partial z} \\
 & + A_1^2 \frac{\partial c_2^{n+1}}{\partial x} + A_2^2 \frac{\partial c_2^{n+1}}{\partial y} + A_3^2 \frac{\partial c_2^{n+1}}{\partial z} \\
 & + B_0^2 c_1^{n+1} + B_1^2 \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial x} + B_2^2 \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial y} + B_3^2 \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial z} \\
 & = b^2
 \end{aligned} \tag{3.111}$$

aplicando el cambio de variable tenemos que

$$A_0^2 = 1 - \frac{\Delta t}{2} \alpha_{22} \tag{3.112}$$

$$A_{11}^2 = - \left(\frac{\Delta t^2}{3} u^2 + \Delta t \mathbf{K}_x \right) \tag{3.113}$$

$$A_{22}^2 = - \left(\frac{\Delta t^2}{3} v^2 + \Delta t \mathbf{K}_y \right) \tag{3.114}$$

$$A_{33}^2 = - \left(\frac{\Delta t^2}{3} w^2 + \Delta t \mathbf{K}_z \right) \tag{3.115}$$

$$A_{12}^2 = - \frac{2}{3} \Delta t^2 uv \tag{3.116}$$

$$A_{13}^2 = - \frac{2}{3} \Delta t^2 uw \tag{3.117}$$

$$A_{23}^2 = - \frac{2}{3} \Delta t^2 vw \tag{3.118}$$

$$A_1^2 = u \frac{1}{x_i} \frac{\partial u}{\partial \xi} + v \frac{1}{y_i} \frac{\partial u}{\partial \eta} + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{1}{\pi} w \right] \frac{\partial u}{\partial \sigma} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{22} u \quad (3.119)$$

$$A_2^2 = u \frac{1}{x_i} \frac{\partial v}{\partial \xi} + v \frac{1}{y_i} \frac{\partial v}{\partial \eta} + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{1}{\pi} w \right] \frac{\partial v}{\partial \sigma} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{22} v \quad (3.120)$$

$$A_3^2 = u \frac{1}{x_i} \frac{\partial w}{\partial \xi} + v \frac{1}{y_i} \frac{\partial w}{\partial \eta} + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{1}{\pi} w \right] \frac{\partial w}{\partial \sigma} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{22} w \quad (3.121)$$

$$B_0^2 = -\frac{\Delta t}{2} \alpha_{21} \quad (3.122)$$

$$B_1^2 = \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{21} u \quad (3.123)$$

$$B_2^2 = \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{21} v \quad (3.124)$$

$$B_3^2 = \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{21} w \quad (3.125)$$

aplicando el cambio de variable a la ecuación (3.111), y ordenado a decuada-
mente

$$\begin{aligned}
& A_0^2 c_2^{n+1} + A_{11}^2 \frac{1}{x_l^2} \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial \xi^2} + A_{22}^2 \frac{1}{y_l^2} \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial \eta^2} \\
& + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \left(A_{11}^2 \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + A_{22}^2 \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + A_{12}^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \right. \\
& + A_{33}^2 \frac{1}{\pi^2} + \left. \left(\frac{\sigma - 1}{\pi^2} \right) \left(A_{13}^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_{23}^2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \right] \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial \sigma^2} \\
& + A_{12}^2 \frac{1}{x_l y_l} \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial \xi \partial \eta} \\
& + \left[\frac{1}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(2A_{11}^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_{12}^2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + A_{13}^2 \frac{1}{\pi} \frac{1}{x_l} \right] \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial \xi \partial \sigma} \\
& + \left[\frac{1}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(2A_{22}^2 \frac{\partial z_s}{\partial y} + A_{12}^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} \right) + A_{23}^2 \frac{1}{\pi} \frac{1}{y_l} \right] \frac{\partial^2 c_2^{n+1}}{\partial \eta \partial \sigma} \\
& + A_1^2 \frac{1}{x_l} \frac{\partial c_2^{n+1}}{\partial \xi} + A_2^2 \frac{1}{y_l} \frac{\partial c_2^{n+1}}{\partial \eta} + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(A_{11}^2 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + A_{22}^2 \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + A_{12}^2 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x \partial y} \right) \right. \\
& + A_1^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_2^2 \frac{\partial z_s}{\partial y} + A_{11}^2 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + A_{22}^2 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + A_{12}^2 \frac{2}{\pi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} \left. \right) \\
& + \frac{1}{\pi^2} \left(A_{13}^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_{23}^2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + A_3^2 \frac{1}{\pi} \left. \right] \frac{\partial c_2^{n+1}}{\partial \sigma} + B_0^2 c_1^{n+1} + B_1^2 \frac{1}{x_l} \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial \xi} \\
& + B_2^2 \frac{1}{y_l} \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial \eta} + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(B_1^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + B_2^2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + B_3^2 \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial c_1^{n+1}}{\partial \sigma} \\
& = b^2 \tag{3.126}
\end{aligned}$$

Con los esquemas en diferencias finitas,

$$\begin{aligned}
& A_0^2 c_{2i,j,k}^{n+1} + A_{11}^2 \frac{1}{x_l^2} \left(\frac{c_{2i-1,j,k}^{n+1} - 2c_{2i,j,k}^{n+1} + c_{2i+1,j,k}^{n+1}}{\Delta \xi^2} \right) \\
& + A_{22}^2 \frac{1}{y_l^2} \left(\frac{c_{2i,j-1,k}^{n+1} - 2c_{2i,j,k}^{n+1} + c_{2i,j+1,k}^{n+1}}{\Delta \eta^2} \right) \\
& + M_1^2 \left(\frac{2 \frac{c_{2i,j,k-1}^{n+1} - (1 + \lambda_k) c_{2i,j,k}^{n+1} + \lambda_k c_{2i,j,k+1}^{n+1}}{\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2)}} \right) \\
& + A_{12}^2 \frac{1}{x_l y_l} \left(\frac{c_{2i+1,j+1,k}^{n+1} - c_{2i-1,j+1,k}^{n+1} - c_{2i+1,j-1,k}^{n+1} + c_{2i-1,j-1,k}^{n+1}}{4 \Delta \xi \Delta \eta} \right) \\
& + M_2^2 \left(\frac{\lambda_k^2 c_{2i+1,j,k+1}^{n+1} - \lambda_k^2 c_{2i-1,j,k+1}^{n+1} - c_{2i+1,j,k-1}^{n+1} + c_{2i-1,j,k-1}^{n+1}}{2 \Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \xi} \right) \\
& + \frac{(\lambda_k^2 - 1) c_{2i-1,j,k}^{n+1} - (\lambda_k^2 - 1) c_{2i+1,j,k}^{n+1}}{2 \Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \xi} \\
& + M_3^2 \left(\frac{\lambda_k^2 c_{2i,j+1,k+1}^{n+1} - \lambda_k^2 c_{2i,j-1,k+1}^{n+1} - c_{2i,j+1,k-1}^{n+1} + c_{2i,j-1,k-1}^{n+1}}{2 \Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \eta} \right) \\
& + \frac{(\lambda_k^2 - 1) c_{2i,j-1,k}^{n+1} - (\lambda_k^2 - 1) c_{2i,j+1,k}^{n+1}}{2 \Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \eta} \\
& + A_1^1 \frac{1}{x_l} \left(\frac{c_{2i+1,j,k}^{n+1} - c_{2i-1,j,k}^{n+1}}{2 \Delta \xi} \right) + A_2^2 \frac{1}{y_l} \left(\frac{c_{2i,j+1,k}^{n+1} - c_{2i,j-1,k}^{n+1}}{2 \Delta \eta} \right) \\
& + M_4^2 \left(\frac{\lambda_k^2 c_{2i,j,k+1}^{n+1} - (\lambda_k^2 - 1) c_{2i,j,k}^{n+1} - c_{2i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2)} \right) \\
& + B_0^2 c_{1i,j,k}^{n+1} + B_1^2 \frac{1}{x_l} \left(\frac{c_{1i+1,j,k}^{n+1} - c_{1i-1,j,k}^{n+1}}{2 \Delta \xi} \right) + B_2^2 \frac{1}{y_l} \left(\frac{c_{1i,j+1,k}^{n+1} - c_{1i,j-1,k}^{n+1}}{2 \Delta \eta} \right) \\
& + M_5^2 \left(\frac{\lambda_k^2 c_{1i,j,k+1}^{n+1} - (\lambda_k^2 - 1) c_{1i,j,k}^{n+1} - c_{1i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2)} \right) \\
& = b^2
\end{aligned} \tag{3.127}$$

donde

$$M_1^2 = \left(\frac{\sigma - 1}{\pi}\right)^2 \left(A_{11}^2 \left(\frac{\partial z_s}{\partial x}\right)^2 + A_{22}^2 \left(\frac{\partial z_s}{\partial y}\right)^2 + A_{12}^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + A_{33}^2 \frac{1}{\pi^2} + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi^2}\right) \left(A_{13}^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_{23}^2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \quad (3.128)$$

$$M_2^2 = \frac{1}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi}\right) \left(2A_{11}^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_{12}^2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + A_{13}^2 \frac{1}{\pi} \frac{1}{x_l} \quad (3.129)$$

$$M_3^2 = \frac{1}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi}\right) \left(2A_{22}^2 \frac{\partial z_s}{\partial y} + A_{12}^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} \right) + A_{23}^2 \frac{1}{\pi} \frac{1}{y_l} \quad (3.130)$$

$$M_4^2 = \left(\frac{\sigma - 1}{\pi}\right) \left(A_{11}^2 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + A_{22}^2 \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + A_{12}^2 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x \partial y} + A_1^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_2^2 \frac{\partial z_s}{\partial y} + A_{11}^2 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x}\right)^2 + A_{22}^2 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y}\right)^2 + A_{12}^2 \frac{2}{\pi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{1}{\pi^2} \left(A_{13}^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + A_{23}^2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + A_3^2 \frac{1}{\pi} \quad (3.131)$$

$$M_5^2 = \left(\frac{\sigma - 1}{\pi}\right) \left(B_1^2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + B_2^2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + B_3^2 \frac{1}{\pi} \quad (3.132)$$

Agrupando por nodos

$$\begin{aligned}
& M_3^2 \frac{1}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta\eta} c_{2i,j-1,k-1}^{n+1} + M_2^2 \frac{1}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta\xi} c_{2i-1,j,k-1}^{n+1} \\
& \left[M_1^2 \frac{2}{\Delta\sigma_k^{+2} (\lambda_k + \lambda_k^2)} - M_4^2 \frac{1}{\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2)} \right] c_{2i,j,k-1}^{n+1} \\
& - M_2^2 \frac{1}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta\xi} c_{2i+1,j,k-1}^{n+1} - M_3^2 \frac{1}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta\eta} c_{2i,j+1,k-1}^{n+1} \\
& + A_{12}^2 \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \frac{1}{4\Delta\xi\Delta\eta} c_{2i-1,j-1,k}^{n+1} \\
& + \left[A_{22}^2 \frac{1}{y_l^2} \frac{1}{\Delta\eta^2} + M_3^2 \frac{\lambda_k - 1}{2\Delta\sigma_k^+ \lambda_k \Delta\eta} - A_2^2 \frac{1}{y_l} \frac{1}{2\Delta\eta} \right] c_{2i,j-1,k}^{n+1} \\
& - A_{12}^2 \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \frac{1}{4\Delta\xi\Delta\eta} c_{2i+1,j-1,k}^{n+1} \\
& + \left[A_{11}^2 \frac{1}{x_l^2} \frac{1}{\Delta\xi^2} + M_2^2 \frac{\lambda_k - 1}{2\Delta\sigma_k^+ \lambda_k \Delta\xi} - A_1^2 \frac{1}{x_l} \frac{1}{2\Delta\xi} \right] c_{2i-1,j,k}^{n+1} \\
& - \left[A_{11}^2 \frac{1}{x_l^2} \frac{2}{\Delta\xi^2} + A_{22}^2 \frac{1}{y_l^2} \frac{2}{\Delta\eta^2} + M_1^2 \frac{2}{\Delta\sigma_k^{+2} \lambda_k} + M_4^2 \frac{\lambda_k - 1}{\Delta\sigma_k^+ \lambda_k} - A_0^2 \right] c_{2i,j,k}^{n+1} \\
& + \left[A_{11}^2 \frac{1}{x_l^2} \frac{1}{\Delta\xi^2} - M_2^2 \frac{\lambda_k - 1}{2\Delta\sigma_k^+ \lambda_k \Delta\xi} + A_1^2 \frac{1}{x_l} \frac{1}{2\Delta\xi} \right] c_{2i+1,j,k}^{n+1} \\
& - A_{12}^2 \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \frac{1}{4\Delta\xi\Delta\eta} c_{2i-1,j+1,k}^{n+1} \\
& + \left[A_{22}^2 \frac{1}{y_l^2} \frac{1}{\Delta\eta^2} - M_3^2 \frac{\lambda_k - 1}{2\Delta\sigma_k^+ \lambda_k \Delta\eta} + A_2^2 \frac{1}{y_l} \frac{1}{2\Delta\eta} \right] c_{2i,j+1,k}^{n+1} \\
& + A_{12}^2 \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \frac{1}{4\Delta\xi\Delta\eta} c_{2i+1,j+1,k}^{n+1} \\
& - M_3^2 \frac{\lambda_k}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + 1) \Delta\eta} c_{2i,j-1,k+1}^{n+1} - M_2^2 \frac{\lambda_k}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + 1) \Delta\xi} c_{2i-1,j,k+1}^{n+1} \\
& + \left[M_1^2 \frac{2}{\Delta\sigma_k^{+2} (\lambda_k + 1)} + M_4^2 \frac{\lambda_k}{\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + 1)} \right] c_{2i,j,k+1}^{n+1} \\
& + M_2^2 \frac{\lambda_k}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + 1) \Delta\xi} c_{2i+1,j,k+1}^{n+1} + M_3^2 \frac{\lambda_k}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + 1) \Delta\eta} c_{2i,j+1,k+1}^{n+1} \\
& - M_5^2 \frac{1}{\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2)} c_{1i,j,k-1}^{n+1} - B_2^2 \frac{1}{y_l} \frac{1}{2\Delta\eta} c_{1i,j-1,k}^{n+1} - B_1^2 \frac{1}{x_l} \frac{1}{2\Delta\xi} c_{1i-1,j,k}^{n+1} \\
& - \left[M_5^2 \frac{\lambda_k - 1}{\Delta\sigma_k^+ \lambda_k} - B_0^2 \right] c_{1i,j,k}^{n+1} + B_1^2 \frac{1}{x_l} \frac{1}{2\Delta\xi} c_{1i+1,j,k}^{n+1} + B_2^2 \frac{1}{y_l} \frac{1}{2\Delta\eta} c_{1i,j+1,k}^{n+1} \\
& + M_5^2 \frac{\lambda_k}{\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + 1)} c_{1i,j,k+1}^{n+1} \\
& = b^2 \tag{3.133}
\end{aligned}$$

Para el segundo miembro, con el cambio de variable tenemos

$$\begin{aligned}
b^2 = & a_2 c_2^n + b_2 \frac{1}{x_l^2} \frac{\partial^2 c_2^n}{\partial \xi^2} + c_2 \frac{1}{y_l^2} \frac{\partial^2 c_2^n}{\partial \eta^2} + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \left(b_2 \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + c_2 \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right. \right. \\
& + e_2 \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} \left. \left. + d_2 \frac{1}{\pi^2} + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi^2} \right) \left(f_2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + g_2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \right] \frac{\partial^2 c_2^n}{\partial \sigma^2} \\
& + e_2 \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \frac{\partial^2 c_2^n}{\partial \xi \partial \eta} + \left[\frac{1}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(2b_2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + e_2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + f_2 \frac{1}{x_l} \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial^2 c_2^n}{\partial \xi \partial \sigma} \\
& + \left[\frac{1}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(2c_2 \frac{\partial z_s}{\partial y} + e_2 \frac{\partial z_s}{\partial x} \right) + g_2 \frac{1}{y_l} \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial^2 c_2^n}{\partial \eta \partial \sigma} \\
& + h_2 \frac{1}{x_l} \frac{\partial c_2^n}{\partial \xi} + i_2 \frac{1}{y_l} \frac{\partial c_2^n}{\partial \eta} + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(b_2 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + b_2 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 \right. \right. \\
& + c_2 \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + c_2 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + e_2 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x \partial y} + e_2 \frac{2}{\pi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} + h_2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + i_2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \left. \right) \\
& + \frac{1}{\pi^2} \left(f_2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + g_2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + j_2 \frac{1}{\pi} \left. \right] \frac{\partial c_2^n}{\partial \sigma} + k k_1 c_1^n - \Delta t^2 \alpha_{21} \mathbf{K}_x \frac{1}{x_l^2} \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial \xi^2} \\
& - \Delta t^2 \alpha_{21} \mathbf{K}_y \frac{1}{y_l^2} \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial \eta^2} + k k_2 \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial \sigma^2} + k k_3 \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial \xi \partial \sigma} \\
& + k k_4 \frac{\partial^2 c_1^n}{\partial \eta \partial \sigma} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{21} u \frac{1}{x_l} \frac{\partial c_1^n}{\partial \xi} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{21} v \frac{1}{y_l} \frac{\partial c_1^n}{\partial \eta} \\
& + (k k_5 + l_2) \frac{\partial c_1^n}{\partial \sigma} - \left(\frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{22} - \Delta t \right) E_2 \\
& - \frac{\Delta t^2}{2} \left[u \frac{\partial E_2}{\partial x} + v \frac{\partial E_2}{\partial y} + w \frac{\partial E_2}{\partial z} \right] \\
& - \frac{\Delta t^3}{6} \left[u \frac{\partial E_{2t}}{\partial x} + v \frac{\partial E_{2t}}{\partial y} + w \frac{\partial E_{2t}}{\partial z} \right] \\
& - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{21} E_1 - \frac{\Delta t^2}{2} \left[\mathbf{K}_x \frac{\partial^2 E_2}{\partial x^2} + \mathbf{K}_y \frac{\partial^2 E_2}{\partial y^2} + \mathbf{K}_z \frac{\partial^2 E_2}{\partial z^2} \right] \\
& + O(\Delta t^4, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\|^2 \Delta t^2)
\end{aligned} \tag{3.134}$$

donde

$$a_2 = 1 + \frac{\Delta t}{2}\alpha_{22} - \frac{\Delta t^2}{2}\alpha_{22}^2 \quad (3.135)$$

$$b_2 = \frac{2}{3}\Delta t^2 u^2 - \Delta t^2 \alpha_{22} \mathbf{K}_x + \frac{\Delta t^3}{6} u u_t \quad (3.136)$$

$$c_2 = \frac{2}{3}\Delta t^2 v^2 - \Delta t^2 \alpha_{22} \mathbf{K}_y + \frac{\Delta t^3}{6} v v_t \quad (3.137)$$

$$d_2 = \frac{2}{3}\Delta t^2 w^2 - \Delta t^2 \alpha_{22} \mathbf{K}_z + \frac{\Delta t^3}{6} w w_t \quad (3.138)$$

$$e_2 = \frac{4}{3}\Delta t^2 uv + \frac{\Delta t^3}{6} (u v_t + u_t v) \quad (3.139)$$

$$f_2 = \frac{4}{3}\Delta t^2 uw + \frac{\Delta t^3}{6} (u w_t + u_t w) \quad (3.140)$$

$$g_2 = \frac{4}{3}\Delta t^2 vw + \frac{\Delta t^3}{6} (v w_t + v_t w) \quad (3.141)$$

$$\begin{aligned} h_2 = & -\frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_x \frac{1}{x_l^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_x \frac{1}{y_l^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_x \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) + \frac{1}{\pi^2} \right] \frac{\partial^2 u}{\partial \sigma^2} - \Delta t^2 \mathbf{K}_x \frac{1}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \sigma} \\ & - \Delta t^2 \mathbf{K}_x \frac{1}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y} \frac{\partial^2 u}{\partial \eta \partial \sigma} + \frac{\Delta t^2}{3} u \frac{1}{x_l} \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{\Delta t^2}{3} v \frac{1}{y_l} \frac{\partial u}{\partial \eta} \\ & + \left[\frac{\Delta t^2}{3} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{\Delta t^2}{3} w \frac{1}{\pi} \right. \\ & \left. - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_x \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(\frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) \right] \frac{\partial u}{\partial \sigma} \\ & + \frac{\Delta t^3}{6} u \frac{1}{x_l} \frac{\partial u_t}{\partial \xi} + \frac{\Delta t^3}{6} v \frac{1}{y_l} \frac{\partial u_t}{\partial \eta} + \frac{\Delta t^3}{6} \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \right. \\ & \left. + w \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial u_t}{\partial \sigma} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{22} u - \Delta t u \end{aligned} \quad (3.142)$$

$$\begin{aligned}
i_2 = & -\frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_y \frac{1}{x_l^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_y \frac{1}{y_l^2} \frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_y \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 \right. \right. \\
& + \left. \left. \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) + \frac{1}{\pi^2} \right] \frac{\partial^2 v}{\partial \sigma^2} - \Delta t^2 \mathbf{K}_y \frac{1}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial^2 v}{\partial \xi \partial \sigma} \\
& - \Delta t^2 \mathbf{K}_y \frac{1}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y} \frac{\partial^2 v}{\partial \eta \partial \sigma} + \frac{\Delta t^2}{3} u \frac{1}{x_l} \frac{\partial v}{\partial \xi} + \frac{\Delta t^2}{3} v \frac{1}{y_l} \frac{\partial v}{\partial \eta} \\
& + \left[\frac{\Delta t^2}{3} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{\Delta t^2}{3} w \frac{1}{\pi} \right. \\
& \left. - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_y \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(\frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) \right] \frac{\partial v}{\partial \sigma} \\
& + \frac{\Delta t^3}{6} u \frac{1}{x_l} \frac{\partial v_t}{\partial \xi} + \frac{\Delta t^3}{6} v \frac{1}{y_l} \frac{\partial v_t}{\partial \eta} + \frac{\Delta t^3}{6} \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \right. \\
& \left. + w \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial v_t}{\partial \sigma} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{22} v - \Delta t v
\end{aligned} \tag{3.143}$$

$$\begin{aligned}
j_2 = & -\frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_z \frac{1}{x_l^2} \frac{\partial^2 w}{\partial \xi^2} - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_z \frac{1}{y_l^2} \frac{\partial^2 w}{\partial \eta^2} - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_z \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \left(\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 \right. \right. \\
& + \left. \left. \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) + \frac{1}{\pi^2} \right] \frac{\partial^2 w}{\partial \sigma^2} - \Delta t^2 \mathbf{K}_z \frac{1}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial^2 w}{\partial \xi \partial \sigma} \\
& - \Delta t^2 \mathbf{K}_z \frac{1}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y} \frac{\partial^2 w}{\partial \eta \partial \sigma} + \frac{\Delta t^2}{3} u \frac{1}{x_l} \frac{\partial w}{\partial \xi} + \frac{\Delta t^2}{3} v \frac{1}{y_l} \frac{\partial w}{\partial \eta} \\
& + \left[\frac{\Delta t^2}{3} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{\Delta t^2}{3} w \frac{1}{\pi} \right. \\
& \left. - \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{K}_z \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(\frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) \right] \frac{\partial w}{\partial \sigma} \\
& + \frac{\Delta t^3}{6} u \frac{1}{x_l} \frac{\partial w_t}{\partial \xi} + \frac{\Delta t^3}{6} v \frac{1}{y_l} \frac{\partial w_t}{\partial \eta} + \frac{\Delta t^3}{6} \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \right. \\
& \left. + w \frac{1}{\pi} \right] \frac{\partial w_t}{\partial \sigma} + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{22} w - \Delta t w
\end{aligned} \tag{3.144}$$

$$kk_1 = -\frac{\Delta t^2}{2}\alpha_{21} - \frac{\Delta t^2}{2}\alpha_{21}\alpha_{11} - \frac{\Delta t^2}{2}\alpha_{21}\alpha_{22} + \Delta t\alpha_{21} \quad (3.145)$$

$$kk_2 = -\Delta t^2\alpha_{21} \left[\left(\frac{\sigma-1}{\pi} \right)^2 \left(\mathbf{K}_x \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \mathbf{K}_y \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right) + \mathbf{K}_z \frac{1}{\pi^2} \right] \quad (3.146)$$

$$kk_3 = -\Delta t^2\alpha_{21}\mathbf{K}_x \frac{2}{x_l} \left(\frac{\sigma-1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial x} \quad (3.147)$$

$$kk_4 = -\Delta t^2\alpha_{21}\mathbf{K}_y \frac{2}{y_l} \left(\frac{\sigma-1}{\pi} \right) \frac{\partial z_s}{\partial y} \quad (3.148)$$

$$kk_5 = -\Delta t^2\alpha_{21} \left(\frac{\sigma-1}{\pi} \right) \left[\mathbf{K}_x \frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + \mathbf{K}_x \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \mathbf{K}_y \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + \mathbf{K}_y \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 \right] \quad (3.149)$$

$$l_2 = \frac{5}{12}\Delta t^2\alpha_{21} \left[\left(\frac{\sigma-1}{\pi} \right) \left(u \frac{\partial z_s}{\partial x} + v \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + \frac{1}{\pi} \right] \quad (3.150)$$

Con los esquemas en diferencias finitas, y $E_2 = 0$, $\frac{\partial E_2}{\partial x} = 0$, $\frac{\partial E_2}{\partial y} = 0$, y $\frac{\partial E_2}{\partial z} = 0$,

tenemos finalmente

$$\begin{aligned}
b^2 = & a_2 c_2^n + b_2 \frac{1}{x_l^2} \left(\frac{c_{2i-1,j,k}^n - 2c_{2i,j,k}^n + c_{2i+1,j,k}^n}{\Delta \xi^2} \right) + c_2 \frac{1}{y_l^2} \left(\frac{c_{2i,j-1,k}^n - 2c_{2i,j,k}^n + c_{2i,j+1,k}^n}{\Delta \eta^2} \right) \\
& + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right)^2 \left(b_2 \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + c_2 \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + e_2 \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + d_2 \frac{1}{\pi^2} \right. \\
& + \left. \left(\frac{\sigma - 1}{\pi^2} \right) \left(f_2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + g_2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \right] \left(\frac{2 \frac{c_{2i,j,k-1}^n - (1 + \lambda_k) c_{2i,j,k}^n + \lambda_k c_{2i,j,k+1}^n}{\Delta \sigma_k^{+2} (\lambda_k + \lambda_k^2)}} \right) \\
& + e_2 \frac{1}{x_l} \frac{1}{y_l} \left(\frac{c_{2i+1,j+1,k}^n - c_{2i-1,j+1,k}^n - c_{2i+1,j-1,k}^n + c_{2i-1,j-1,k}^n}{4 \Delta \xi \Delta \eta} \right) \\
& + \left[\frac{1}{x_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(2b_2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + e_2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + f_2 \frac{1}{x_l} \frac{1}{\pi} \right] \left(\frac{\lambda_k^2 c_{2i+1,j,k+1}^n - \lambda_k^2 c_{2i-1,j,k+1}^n}{2 \Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \xi} \right. \\
& + \left. \frac{-c_{2i+1,j,k-1}^n + c_{2i-1,j,k-1}^n + (\lambda_k^2 - 1) c_{2i-1,j,k}^n - (\lambda_k^2 - 1) c_{2i+1,j,k}^n}{2 \Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \xi} \right) \\
& + \left[\frac{1}{y_l} \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(2c_2 \frac{\partial z_s}{\partial y} + e_2 \frac{\partial z_s}{\partial x} \right) + g_2 \frac{1}{y_l} \frac{1}{\pi} \right] \left(\frac{\lambda_k^2 c_{2i,j+1,k+1}^n - \lambda_k^2 c_{2i,j-1,k+1}^n}{2 \Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \eta} \right. \\
& + \left. \frac{-c_{2i,j+1,k-1}^n + c_{2i,j-1,k-1}^n + (\lambda_k^2 - 1) c_{2i,j-1,k}^n - (\lambda_k^2 - 1) c_{2i,j+1,k}^n}{2 \Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta \eta} \right) \\
& + h_2 \frac{1}{x_l} \left(\frac{c_{2i+1,j,k}^n - c_{2i-1,j,k}^n}{2 \Delta \xi} \right) + i_2 \frac{1}{y_l} \left(\frac{c_{2i,j+1,k}^n - c_{2i,j-1,k}^n}{2 \Delta \eta} \right) \\
& + \left[\left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(b_2 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x^2} + b_2 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + c_2 \frac{\partial^2 z_s}{\partial y^2} + c_2 \frac{2}{\pi} \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + e_2 \frac{\partial^2 z_s}{\partial x \partial y} \right. \right. \\
& + e_2 \frac{2}{\pi} \frac{\partial z_s}{\partial x} \frac{\partial z_s}{\partial y} + h_2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + i_2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \left. \right) + \frac{1}{\pi^2} \left(f_2 \frac{\partial z_s}{\partial x} + g_2 \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) + j_2 \frac{1}{\pi} \left. \right] \\
& \left(\frac{\lambda_k^2 c_{2i,j,k+1}^n - (\lambda_k^2 - 1) c_{2i,j,k}^n - c_{2i,j,k-1}^n}{\Delta \sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2)} \right) + k k_1 c_1^n \\
& - \Delta t^2 \alpha_{21} \mathbf{K}_x \frac{1}{x_l^2} \left(\frac{c_{1i-1,j,k}^n - 2c_{1i,j,k}^n + c_{1i+1,j,k}^n}{\Delta \xi^2} \right) \\
& - \Delta t^2 \alpha_{21} \mathbf{K}_y \frac{1}{y_l^2} \left(\frac{c_{1i,j-1,k}^n - 2c_{1i,j,k}^n + c_{1i,j+1,k}^n}{\Delta \eta^2} \right)
\end{aligned}$$

(3.151)

$$\begin{aligned}
& +kk_2 \left(\frac{2c_{1i,j,k-1}^n - (1 + \lambda_k) c_{1i,j,k}^n + \lambda_k c_{1i,j,k+1}^n}{\Delta\sigma_k^{+2} (\lambda_k + \lambda_k^2)} \right) \\
& +kk_3 \left(\frac{\lambda_k^2 c_{1i+1,j,k+1}^n - \lambda_k^2 c_{1i-1,j,k+1}^n - c_{1i+1,j,k-1}^n + c_{1i-1,j,k-1}^n}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta\xi} \right. \\
& + \frac{(\lambda_k^2 - 1) c_{1i-1,j,k}^n - (\lambda_k^2 - 1) c_{1i+1,j,k}^n}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta\xi} \left. + kk_4 \left(\frac{\lambda_k^2 c_{1i,j+1,k+1}^n - \lambda_k^2 c_{1i,j-1,k+1}^n}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta\eta} \right. \right. \\
& + \left. \left. \frac{-c_{1i,j+1,k-1}^n + c_{1i,j-1,k-1}^n + (\lambda_k^2 - 1) c_{1i,j-1,k}^n - (\lambda_k^2 - 1) c_{1i,j+1,k}^n}{2\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2) \Delta\eta} \right) \right) \\
& + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{21} u \frac{1}{x_l} \left(\frac{c_{1i+1,j,k}^n - c_{1i-1,j,k}^n}{2\Delta\xi} \right) + \frac{5}{12} \Delta t^2 \alpha_{21} v \frac{1}{y_l} \left(\frac{c_{1i,j+1,k}^n - c_{1i,j-1,k}^n}{2\Delta\eta} \right) \\
& + (kk_5 + l_2) \left(\frac{\lambda_k^2 c_{1i,j,k+1}^n - (\lambda_k^2 - 1) c_{1i,j,k}^n - c_{1i,j,k-1}^n}{\Delta\sigma_k^+ (\lambda_k + \lambda_k^2)} \right) \\
& - \frac{\Delta t^3}{6} \left[u \frac{\partial E_{2t}}{\partial x} + v \frac{\partial E_{2t}}{\partial y} + w \frac{\partial E_{2t}}{\partial z} \right] - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{21} E_1 \\
& - \frac{\Delta t^2}{2} \left[\mathbf{K}_x \frac{\partial^2 E_2}{\partial x^2} + \mathbf{K}_y \frac{\partial E_2}{\partial y^2} + \mathbf{K}_z \frac{\partial E_2}{\partial z^2} \right] - \frac{\Delta t^2}{2} \alpha_{21} E_1 \\
& + O(\Delta t^4, \|\mathbf{K}_i\| \Delta t^3, \|\mathbf{K}_i\|^2 \Delta t^2) \tag{3.152}
\end{aligned}$$

3.4.2. Ecuaciones Correspondientes a los Nodos del Contorno

En los nodos correspondientes al contorno del dominio Ω se cumple que

$$-\vec{n} \cdot \mathbf{K}_i \vec{\nabla} c_i = v_{di} c_i \quad \text{en} \quad \Gamma_2 \tag{3.153}$$

\vec{n} es un vector unitario en la dirección normal a la superficie del terreno en el sentido saliente

$$-\vec{n} = \frac{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x}, \frac{\partial z_s}{\partial y}, -1 \right)}{\left(\sqrt{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2} + 1 \right)} \tag{3.154}$$

desarrollando la ecuación (3.153), tenemos

$$\frac{\partial z_s}{\partial x} \mathbf{K}_x \frac{\partial c_i}{\partial x} + \frac{\partial z_s}{\partial y} \mathbf{K}_y \frac{\partial c_i}{\partial y} - \mathbf{K}_z \frac{\partial c_i}{\partial z} = -v_{di} c_i \left(\sqrt{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + 1} \right) \quad (3.155)$$

Con el cambio de variable

$$\begin{aligned} & \frac{\partial z_s}{\partial x} \mathbf{K}_x \left(\frac{1}{x_l} \frac{\partial c_i}{\partial \xi} + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial c_i}{\partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial x} \right) \\ & + \frac{\partial z_s}{\partial y} \mathbf{K}_y \left(\frac{1}{y_l} \frac{\partial c_i}{\partial \eta} + \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \frac{\partial c_i}{\partial \sigma} \frac{\partial z_s}{\partial y} \right) \\ & - \mathbf{K}_z \frac{1}{\pi} \frac{\partial c_i}{\partial \sigma} \\ & = -v_{di} c_i \left(\sqrt{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + 1} \right) \end{aligned} \quad (3.156)$$

Agrupando adecuadamente,

$$C1 \frac{\partial c_i}{\partial \xi} + C2 \frac{\partial c_i}{\partial \eta} + C3 \frac{\partial c_i}{\partial \sigma} = -v_{di} c_i \left(\sqrt{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + 1} \right) \quad (3.157)$$

donde

$$C1 = \mathbf{K}_x \frac{1}{x_l} \frac{\partial z_s}{\partial x} \quad (3.158)$$

$$C2 = \mathbf{K}_y \frac{1}{y_l} \frac{\partial z_s}{\partial y} \quad (3.159)$$

$$C3 = \left(\frac{\sigma - 1}{\pi} \right) \left(\mathbf{K}_x \left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \mathbf{K}_y \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 - \mathbf{K}_z \frac{1}{\pi} \right) \quad (3.160)$$

Sustituyendo en la ecuación (3.157) los esquemas en diferencias finitas de las primeras derivadas de la especie contaminante i con respecto a las coordenadas conformes, tal como se muestran en las tablas (2.2 y 2.3), obtenemos las ecuaciones correspondientes a cada nodo del dominio según su número de

referencia.

3.4.2.1. Nodos de Número de Referencia 1

$$\begin{aligned}
& -C2 \frac{1}{2\Delta\eta} c_{i,j-1,k}^n - C1 \frac{1}{2\Delta\xi} c_{i-1,j,k}^n - C3 \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} c_{i,j,k}^n \\
& + C1 \frac{1}{2\Delta\xi} c_{i+1,j,k}^n + C2 \frac{1}{2\Delta\eta} c_{i,j+1,k}^n + C3 \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+} c_{i,j,k+1}^n \\
& - C3 \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} c_{i,j,k+2}^n \\
= & -v_{di} c_i \left(\sqrt{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y}\right)^2 + 1} \right) \tag{3.161}
\end{aligned}$$

3.4.2.2. Nodos de Número de Referencia 2

$$\frac{(2 + \lambda_{k-1})}{\Delta\sigma_k^- (1 + \lambda_{k-1})} c_{i,j,k}^n + \frac{1}{\Delta\sigma_k^- \lambda_{k-1} (1 + \lambda_{k-1})} c_{i,j,k-2}^n - \frac{(1 + \lambda_{k-1})}{\Delta\sigma_k^- \lambda_{k-1}} c_{i,j,k-1}^n = 0 \tag{3.162}$$

3.4.2.3. Nodos de Número de Referencia 3

$$c_{i,j,k}^n = 0 \tag{3.163}$$

3.4.2.4. Nodo de Número de Referencia 4

$$\begin{aligned}
 & - \left(C1 \frac{3}{2\Delta\xi} + C2 \frac{3}{2\Delta\eta} + C3 \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \right) c_{i,j,k}^n + C1 \frac{2}{\Delta\xi} c_{i+1,j,k}^n \\
 & - C1 \frac{1}{2\Delta\xi} c_{i+2,j,k}^n + C2 \frac{2}{\Delta\eta} c_{i,j+1,k}^n - C2 \frac{1}{2\Delta\eta} c_{i,j+2,k}^n \\
 & + C3 \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+} c_{i,j,k+1}^n - C3 \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} c_{i,j,k+2}^n \\
 = & -v_{di} c_i \left(\sqrt{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + 1} \right) \tag{3.164}
 \end{aligned}$$

3.4.2.5. Nodo con Número de Referencia 5

$$\begin{aligned}
 & C1 \frac{1}{2\Delta\xi} c_{i-2,j,k}^n - C1 \frac{2}{\Delta\xi} c_{i-1,j,k}^n \\
 & + \left(C1 \frac{3}{2\Delta\xi} - C2 \frac{3}{2\Delta\eta} - C3 \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \right) c_{i,j,k}^n \\
 & + C2 \frac{2}{\Delta\eta} c_{i,j+1,k}^n - C2 \frac{1}{2\Delta\eta} c_{i,j+2,k}^n + C3 \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+} c_{i,j,k+1}^n \\
 & - C3 \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} c_{i,j,k+2}^n \\
 = & -v_{di} c_i \left(\sqrt{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + 1} \right) \tag{3.165}
 \end{aligned}$$

3.4.2.6. Nodo con Número de Referencia 6

$$\begin{aligned}
& C2 \frac{1}{2\Delta\eta} c_{i,j-2,k}^n - C2 \frac{2}{\Delta\eta} c_{i,j-1,k}^n + C1 \frac{1}{2\Delta\xi} c_{i-2,j,k}^n - C1 \frac{2}{\Delta\xi} c_{i-1,j,k}^n \\
& + \left(C1 \frac{3}{2\Delta\xi} + C2 \frac{3}{2\Delta\eta} - C3 \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \right) c_{i,j,k}^n \\
& + C3 \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+} c_{i,j,k+1}^n - C3 \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} c_{i,j,k+2}^n \\
= & -v_{di} c_i \left(\sqrt{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + 1} \right) \tag{3.166}
\end{aligned}$$

3.4.2.7. Nodo con Número de Referencia 7

$$\begin{aligned}
& C2 \frac{1}{2\Delta\eta} c_{i,j-2,k}^n - C2 \frac{2}{\Delta\eta} c_{i,j-1,k}^n \\
& + \left(-C1 \frac{3}{2\Delta\xi} + C2 \frac{3}{2\Delta\eta} - C3 \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \right) c_{i,j,k}^n \\
& + C1 \frac{2}{\Delta\xi} c_{i+1,j,k}^n - C1 \frac{1}{2\Delta\xi} c_{i+2,j,k}^n + C3 \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+} c_{i,j,k+1}^n \\
& - C3 \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} c_{i,j,k+2}^n \\
= & -v_{di} c_i \left(\sqrt{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + 1} \right) \tag{3.167}
\end{aligned}$$

3.4.2.8. Nodos con Número de Referencia 8

$$\begin{aligned}
 & -C1 \frac{1}{2\Delta\xi} c_{i-1,j,k}^n - \left(C2 \frac{3}{2\Delta\eta} + C3 \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \right) c_{i,j,k}^n \\
 & + C1 \frac{1}{2\Delta\xi} c_{i+1,j,k}^n + C2 \frac{2}{\Delta\eta} c_{i,j+1,k}^n - C2 \frac{1}{2\Delta\eta} c_{i,j+2,k}^n \\
 & + C3 \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+} c_{i,j,k+1}^n - C3 \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} c_{i,j,k+2}^n \\
 = & -v_{di} c_i \left(\sqrt{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + 1} \right) \tag{3.168}
 \end{aligned}$$

3.4.2.9. Nodos con Número de Referencia 9

$$\begin{aligned}
 & -C2 \frac{1}{2\Delta\eta} c_{i,j-1,k}^n + C1 \frac{1}{2\Delta\xi} c_{i-2,j,k}^n - C1 \frac{2}{\Delta\xi} c_{i-1,j,k}^n \\
 & + \left(C1 \frac{3}{2\Delta\xi} - C3 \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \right) c_{i,j,k}^n + C2 \frac{1}{2\Delta\eta} c_{i,j+1,k}^n \\
 & + C3 \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+} c_{i,j,k+1}^n - C3 \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} c_{i,j,k+2}^n \\
 = & -v_{di} c_i \left(\sqrt{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + 1} \right) \tag{3.169}
 \end{aligned}$$

3.4.2.10. Nodos con Número de Referencia 10

$$\begin{aligned}
& C2 \frac{1}{2\Delta\eta} c_{i,j-2,k}^n - C2 \frac{2}{\Delta\eta} c_{i,j-1,k}^n - C1 \frac{1}{2\Delta\xi} c_{i-1,j,k}^n \\
& + \left(C2 \frac{3}{2\Delta\eta} - C3 \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \right) c_{i,j,k}^n \\
& C1 \frac{1}{2\Delta\xi} c_{i+1,j,k}^n + C3 \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+} c_{i,j,k+1}^n - C3 \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} c_{i,j,k+2}^n \\
= & -v_{di} c_i \left(\sqrt{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + 1} \right) \tag{3.170}
\end{aligned}$$

3.4.2.11. Nodos con Número de Referencia 11

$$\begin{aligned}
& -C2 \frac{1}{2\Delta\eta} c_{i,j-1,k}^n - \left(C1 \frac{3}{2\Delta\xi} + C3 \frac{2\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} \right) c_{i,j,k}^n \\
& + C1 \frac{2}{\Delta\xi} c_{i+1,j,k}^n - C1 \frac{1}{2\Delta\xi} c_{i+2,j,k}^n + C2 \frac{1}{2\Delta\eta} c_{i,j+1,k}^n \\
& + C3 \frac{\lambda_{k+1} + 1}{\Delta\sigma^+} c_{i,j,k+1}^n - C3 \frac{(\lambda_{k+1})^2}{\Delta\sigma^+ (\lambda_{k+1} + 1)} c_{i,j,k+2}^n \\
= & -v_{di} c_i \left(\sqrt{\left(\frac{\partial z_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z_s}{\partial y} \right)^2 + 1} \right) \tag{3.171}
\end{aligned}$$

3.5. Resolución del Sistema de Ecuaciones

De forma similar al modelo de ajuste de campos de vientos, obtenemos un sistema de ecuaciones para la dispersión de contaminantes en la atmósfera de orden $2n$ el cual es no simétrico y lo resolvemos por el algoritmo Bi-CGSTAB, utilizando el preconditionador diagonal, dichas matrices son de tipo sparse y se trabajan de forma compacta, ensamblándolas adecuadamente.

Capítulo 4

Experimentos Numéricos

En este capítulo se presentan una serie de simulaciones, realizadas a fin de validar los modelos desarrollados anteriormente. Dentro de las utilidades del trabajo, están la obtención de datos de campos de viento, a partir de medidas realizadas en estaciones meteorológicas. En base al modelo anterior, el modelo de contaminación permite prever la dispersión de contaminantes en la atmósfera a partir de datos de focos de emisión.

4.1. Aspectos Generales

La zona de estudio está localizada en una de las islas occidentales del archipiélago canario. Se trata de la isla de La Palma (ver figura 4.1) y más concretamente la zona sur de ésta.

Consideramos un dominio (Ω) de $31200m \times 31200m \times 4000m$ y contamos con los datos reales de la topografía del terreno limitada por este dominio (ver figura 4.2). El punto más alto está a $2150m$ sobre el nivel del mar.

Las medidas del viento fueron tomadas en cuatro estaciones meteorológicas, tres están ubicadas en la zona de Manchas Blancas; los datos fueron pro-



Figura 4.1: *Islas Canarias*

porcionados por el Instituto Tecnológico de Canarias (ITC). Estas tres estaciones las denotaremos por, MBI, MBII y MBIII. La cuarta estación, que denotaremos por LPA, está ubicada en el aeropuerto de La Palma; estos datos fueron proporcionados por el Centro Meteorológico Territorial de Canarias Occidental (ver figura4.3).

El período a estudiar está comprendido entre el 26 de enero del año 1995 hasta el 17 de Marzo del mismo año. Las medidas fueron tomadas cada media hora, excepto las proporcionadas por MBIII que estaban cada 20 minutos, por lo que debimos hacer una interpolación de dichas medidas.

La Palma

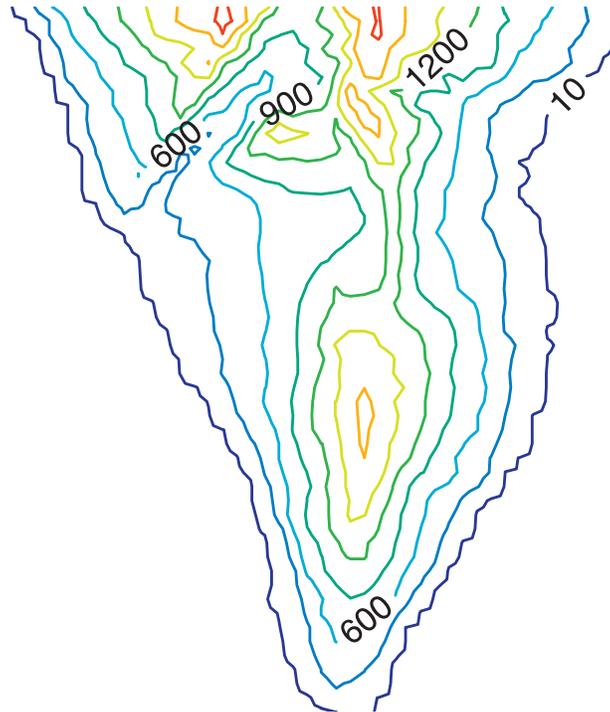


Figura 4.2: *Isolíneas de la Topografía, (en m).*

4.2. Cálculo de Campos de Viento

El realizar la transformación a coordenadas conformes al terreno en el dominio considerado Ω nos permite construir un dominio tridimensional cúbico unitario (Ω'), donde el terreno está definido en el plano horizontal. El espaciado vertical variable elegido está definido en la ecuación (2.116), el cual nos permite utilizar esquemas de segundo orden y una mayor discretización en las cercanías del terreno como se observa en la figura (4.4). Para cada una de las estaciones de medida (MBI, MBII, MBIII y LPA) se muestran en la figura (4.5) las correspondientes rosas de los vientos durante el período de estudio. La dirección está dada en grados norte en el sentido horario, las velocidades están dadas en m/s , siendo la latitud de $\phi = 28^{\circ}36'Norte$.



Figura 4.3: Localización de las estaciones de medida

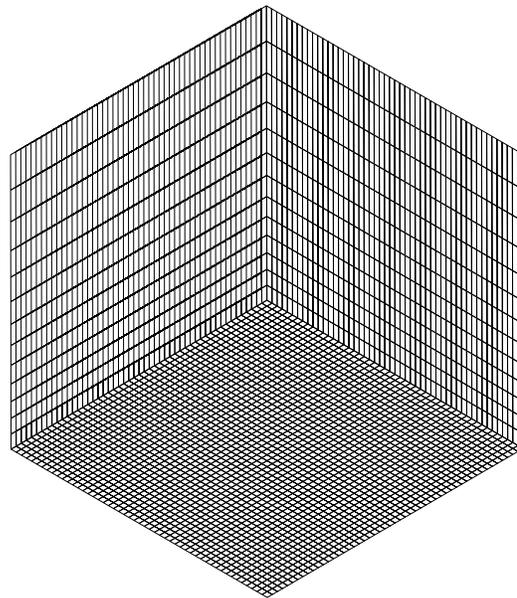
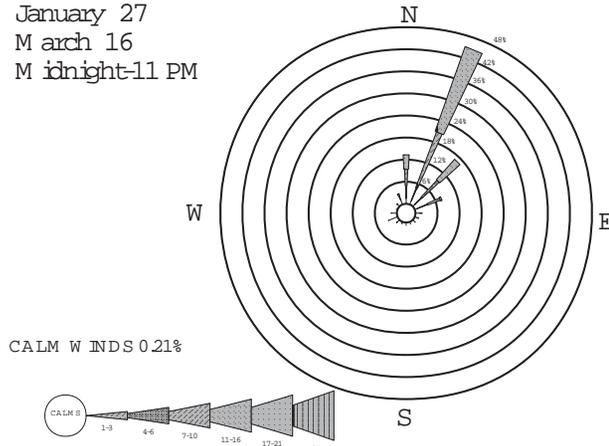
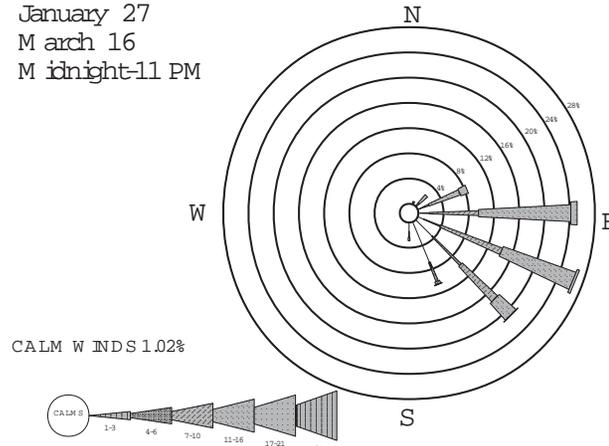


Figura 4.4: Malla de cubo unitario (51 x 51 x 14 nodos)

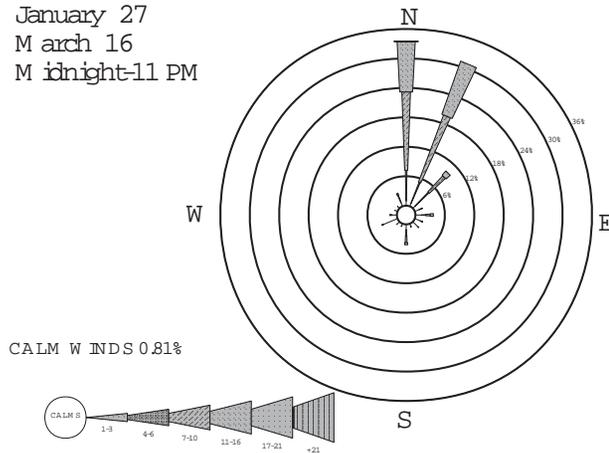
M anchas Blancas I
 January 27
 March 16
 Midnight-11 PM



M anchas Blancas II
 January 27
 March 16
 Midnight-11 PM



M anchas Blancas III
 January 27
 March 16
 Midnight-11 PM



La Palma Airport
 January 27
 March 16
 Midnight-11 PM

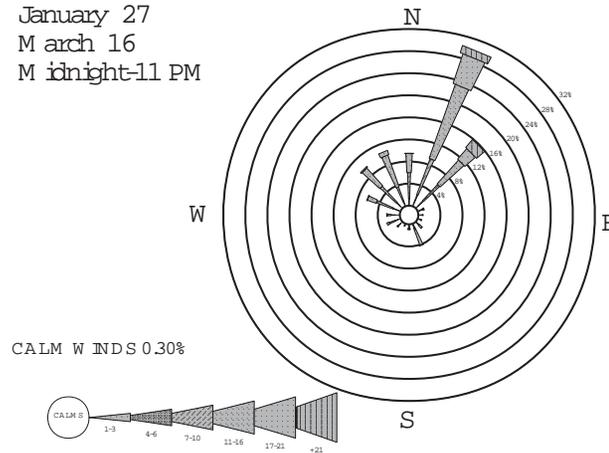


Figura 4.5: Rosas de los vientos de las estaciones de medida

Teniendo en cuenta la información obtenida de las rosas de los vientos hemos seleccionado tres casos de estudio, que se detallarán seguidamente. La velocidad del viento y la dirección seleccionada para cada caso se muestran en la tabla (4.1).

Otros valores utilizados son:

- El parámetro de peso $\varepsilon = 0,5$ utilizado en la interpolación horizontal (2.65).
- La longitud de rugosidad $z_0 = 0,25 \text{ m}$ (que en estazona de La Palma se corresponde a una superficie cubierta de árboles, ver figura 2.4).
- La constante $\gamma = 0,3$ que depende de la estabilidad atmosférica (ver ecuación 2.55).
- Los módulos de precisión de Gauss α_1 y α_2 son $\frac{\sqrt{2}}{2}$ y $\frac{1}{2}$ respectivamente. Por tanto los tensores diagonales de trasmisión son $T_h = 1$ y $T_v = 2$ (ver ecuación 2.9).

4.2.1. Caso I

Este caso corresponde a condiciones cercanas a la moda, tanto de la dirección del viento como de su velocidad, durante todo el período de medida.

Aunque estos valores se alcanzan generalmente para diferentes momentos en cada estación, como mejor aproximación se seleccionaron los datos correspondientes al 28 de enero, entre las 5.00 y 6.00 a.m. El viento geostrófico se aproximó por la ley de Lotta, tomándose, en forma vectorial $\vec{v}_g = (-38,85, 3,40, 0,00)$ en m/s . La clase de estabilidad de Pasquill considerada fue tipo D (neutra). En la figura (4.6) se muestran la magnitud de la velocidad de viento en cuatro capas diferentes sobre el terreno.

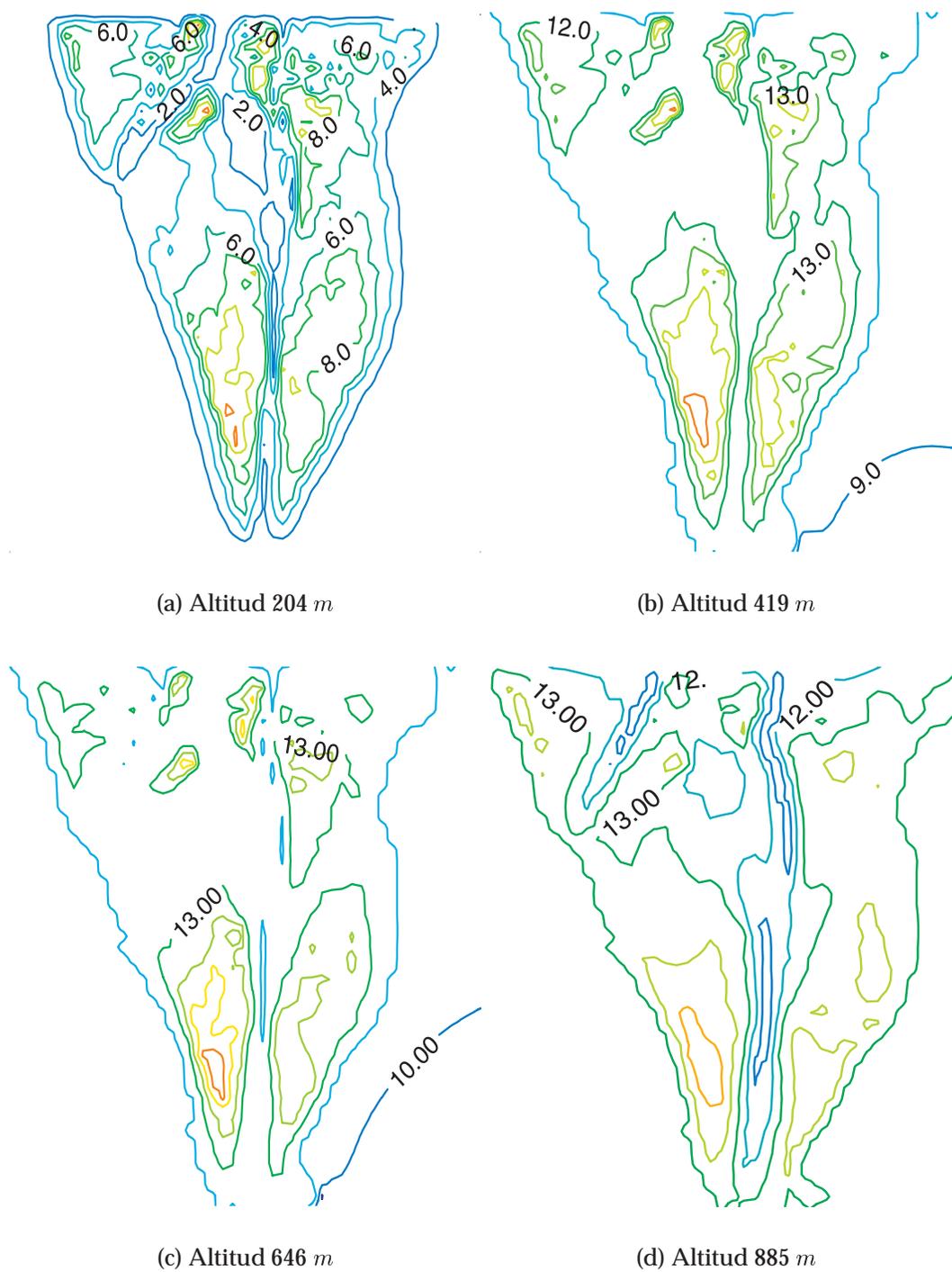


Figura 4.6: Caso I, isolíneas de la velocidad del viento (en m/s) en las cuatro capas mas bajas.

		<i>MBI</i>	<i>MBII</i>	<i>MBIII</i>	<i>LPA</i>
<i>Coordenadas</i>	<i>X</i>	227270,00	227155,00	227564,00	231715,00
	<i>Y</i>	3161499,00	3161564,00	3161443,00	3168209,00
	<i>Z</i>	460,00	475,00	390,00	40,00
<i>CasoI</i>	<i>Velocidad</i>	12,87	13,10	8,80	11,11
	<i>Direccion</i>	29,00	105,50	3,50	23,00
<i>CasoII</i>	<i>Velocidad</i>	16,05	20,60	17,10	33,89
	<i>Direccion</i>	22,00	42,90	4,90	40,00
<i>CasoIII</i>	<i>Velocidad</i>	2,41	2,60	0,20	4,72
	<i>Direccion</i>	348,00	167,30	250,33	51,00

Tabla 4.1: Localización de las estaciones de medida, dirección y velocidad de las estaciones

4.2.2. Caso II

Este caso representa las medidas máximas de la velocidad del viento. Las medidas estudiadas fueron tomadas en el mismo período de tiempo: las últimas horas del 21 de febrero y las primeras del día siguiente. El viento geostrofico fué $\vec{v}_g = (-49,43, 24,11, 0,00)$ *m/s* y la clase de estabilidad de Pasquill también tipo D. La figura (4.7) representa la magnitud de la velocidad de viento en las mismas capas del caso I.

4.2.3. Caso III

Aquí hemos considerado un caso en que la clase de estabilidad de Pasquill fuera tipo C (ligeramente inestable), condición que se cumplía el 10 de febrero, a las 0:00 a.m, cuando la suma de los vectores velocidad de cada estación era

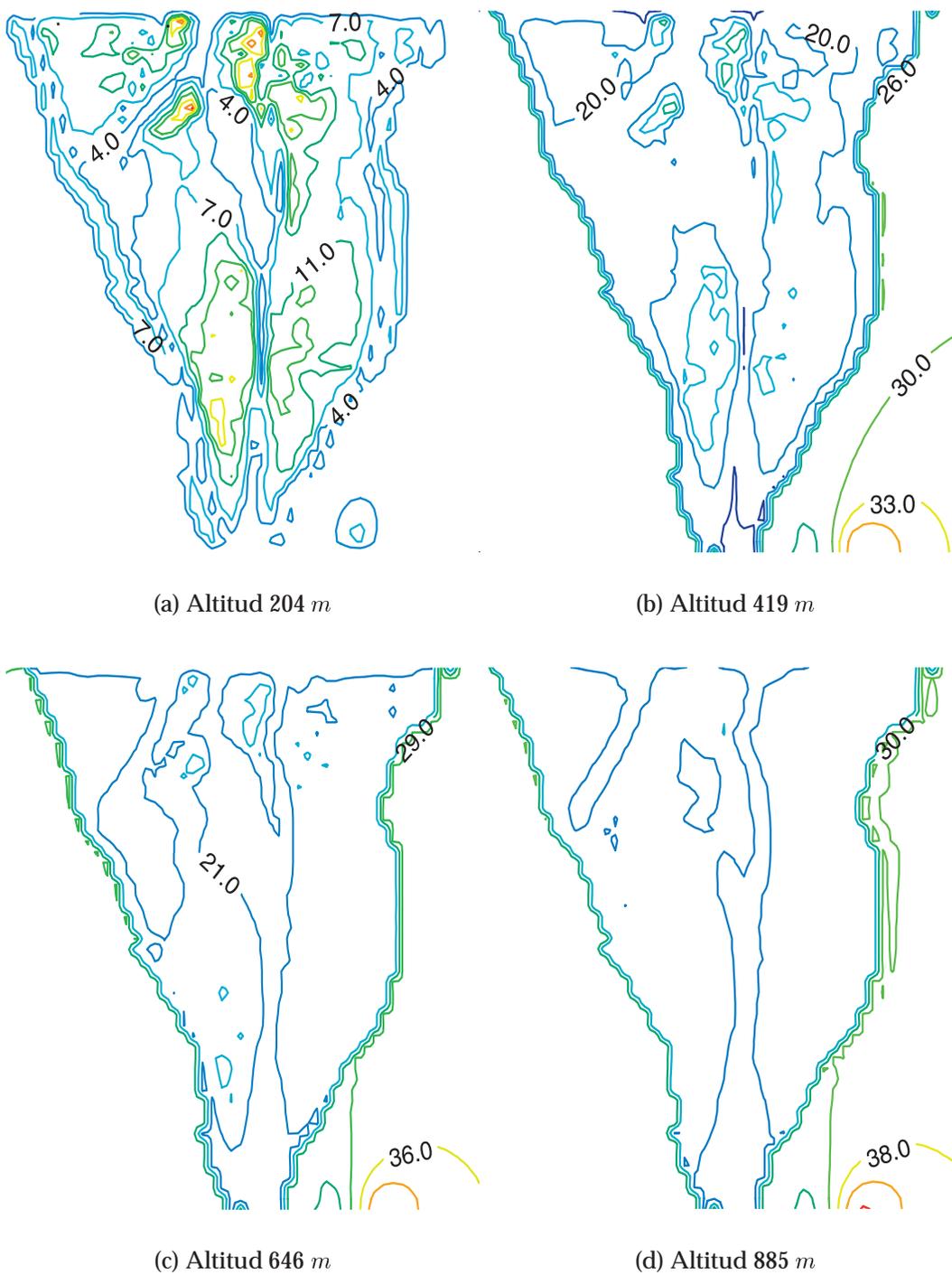


Figura 4.7: Caso II, *Isolíneas de la velocidad del viento (en m/s), en las cuatro capas mas bajas*

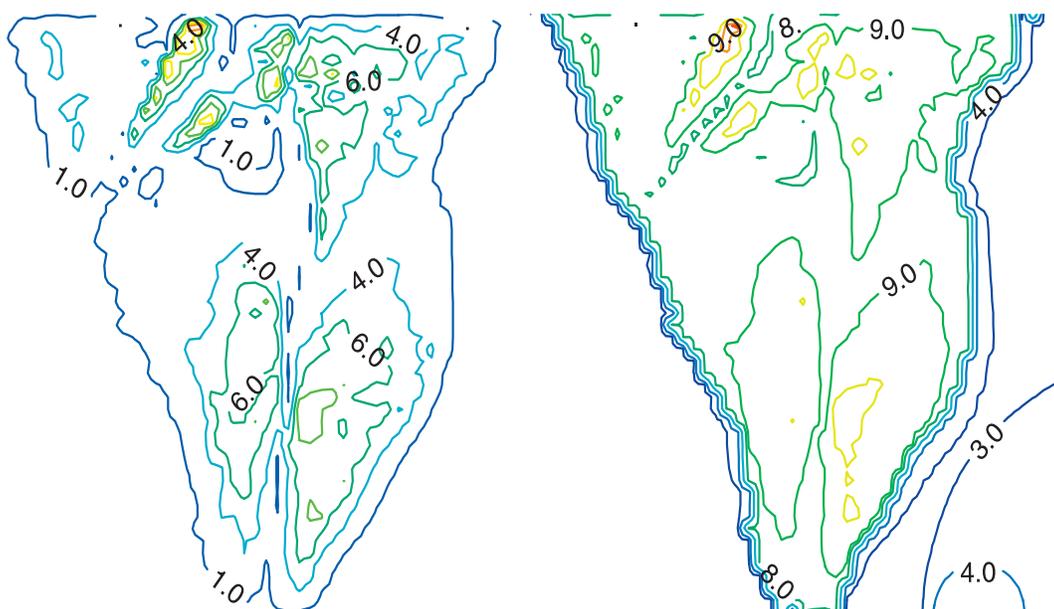
mínima. El viento geostrófico fue $\vec{v}_g = (-7,25, 3,38, 0,00) \text{ m/s}$ y nuevamente mostramos la magnitud de la velocidad en la figura (4.8).

4.2.4. Discusión

Los resultados mostrados en las figuras (4.6a), (4.7a) y (4.8a) pueden ser comentadas desde varios puntos de vista. En primer lugar podemos observar como las isolíneas de módulos de velocidades están directamente relacionados con el mapa topográfico. En esta región el viento sopla a menudo en dirección *NE*, más concretamente del *Noreste* hacia el *sur*, dirección en la cual crecen las fuerzas de los vientos, tal como muestran los mapas de velocidades. De este hecho se concluye que el área sureste es la mejor para la localización de parques eólicos. Sin embargo, la decisión final depende de otros parámetros, no sólo de tipo económico sino incluso de carácter ecológico.

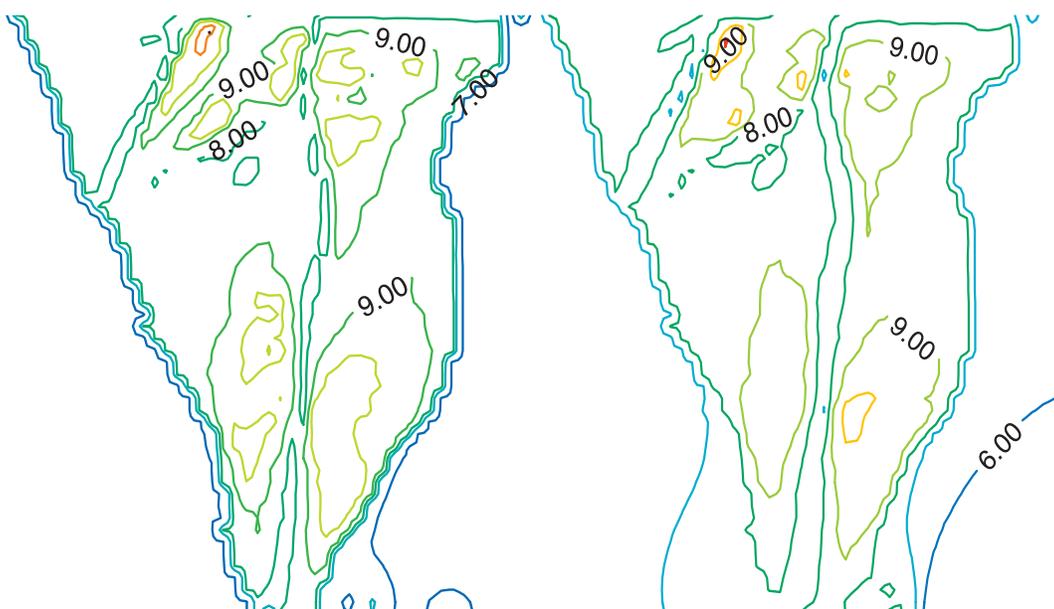
En los experimentos numéricos la fecha correspondiente al viento geostrófico debe ser cuidadosamente comprobada puesto que el modelo se altera bastante por estas variaciones. En general tendremos que comparar el valor obtenido por la ley de Lotta con los datos experimentales. Aunque el modelo muestra unos comportamientos interesantes en estos experimentos numéricos, éstos resultados deben ser estudiados bajo otras condiciones de estabilidad, condiciones que no hemos podido testar al no estar presentes en ninguna zona de las Islas Canarias.

En vista del significado de la rosa de los vientos en Manchas Blancas II, para los casos I, II y III, estudiamos cuando el modelo optimizado en base a las otras tres estaciones puede predecir la velocidad del viento en ésta. En el caso



(a) Altitud 204 m

(b) Altitud 419 m



(c) Altitud 646 m

(d) Altitud 885 m

Figura 4.8: Caso III, *Isolíneas de la velocidad del viento (en m/s), en las cuatro capas mas bajas*

I, el error de la predicción de la velocidad en MBII fue del 6 %. En el caso II, fue del 12 % y en el caso III, del 37 %. Claramente en el caso III, los resultados cambian completamente si no usamos las medidas de la estación MBII. En los otros casos, la variación no es tan acentuada. De hecho, la situación del caso III es extremadamente difícil debido a que fue seleccionada de tal manera que la suma de los vectores de la velocidad de cada estación es mínima. Por tanto si realizamos una pequeña variación, la relación podría ser diferente.

Es decir, si las medidas para MBII no son tomadas en cuenta, los resultados corresponderían a otra situación muy diferente del caso III definido antes.

En los otros casos, las medidas de las velocidades y las direcciones de los vientos en MBII están más próximas a las de las estaciones más cercanas (MBI).

Por otro lado, utilizamos el mismo experimento con diferentes módulos de precisión de Gauss. Como la función definida en (2.3) debe ser minimizada, el uso de la variación relativa de los módulos en lugar de α_1 y α_2 no produce diferencias excepto algún efecto numérico. Por tanto, hemos cambiado el valor de α_2 y mantenido el de α_1 . Hemos considerado dos nuevas situaciones: $\alpha_1 \ll \alpha_2$ ($T_h = 1$ y $T_v = 10^{-4}$) y $\alpha_1 \gg \alpha_2$ ($T_h = 1$ y $T_v = 10^4$), es decir un ajuste vertical y horizontal puros, respectivamente.

En el caso I, el mejor resultado fue obtenido para $T_h = 1$ y $T_v = 2$ (la elección inicial). Por tanto, la media de error de la velocidad de los vientos en las proximidades de MBII fue del 6 %, como se indicó anteriormente. Por el contrario, en los casos II y III, el mejor resultado fue obtenido para el ajuste vertical. En este caso, el error para MBII fue del 10 % y 32 %, respectivamente.

El nivel de discretización de la malla afecta a la precisión del modelo, que

viene dado por el orden de consistencia de los esquemas en diferencias finitas. Si reducimos el espaciado vertical o el horizontal, el error puede ser estimado a priori por las correspondientes cotas de los esquemas. Evidentemente, a mayor número de nodos, mayor precisión. Por tanto, el usuario debe seleccionar la precisión según los recursos computacionales disponibles.

La función usada para la interpolación de la topografía influye en general en el resultado del modelo. Sin embargo, en nuestro modelo la función $Z_s(x, y)$ prácticamente no afectó a los resultados, ya que la malla correspondiente a los datos topográficos y relativa a $Z_s(x, y)$ se ha definido más fina que la correspondiente a los esquemas en diferencias finitas. En otras palabras, los datos de la topografía son casi exactos para una malla razonable (en nuestro experimento, $51 \times 51 \times 14$, nodos).

4.3. Cálculo de dispersión de contaminantes

El campo de velocidades del viento que se obtuvo anteriormente nos va a permitir el estudio de como se dispersan los contaminantes en la atmósfera. De forma similar al modelo de ajuste de campos de viento, obtenemos un sistema de ecuaciones para el modelo de dispersión de contaminantes, de orden $2n$, que hemos resuelto con una tolerancia $\epsilon = 10^{-15}$.

Otros valores utilizados son:

- El tensor diagonal de difusividad (3.1)

$$K_{SO_{2x}}(K_{x1}) = K_{SO_{2y}}(K_{y1}) = K_{H_2SO_{4x}}(K_{x2}) = K_{H_2SO_{4y}}(K_{y2}) = 50m^2/s$$

$$K_{SO_{2z}}(K_{z1}) = K_{H_2SO_{4z}}(K_{z2}) = 25m^2/s.$$

- Las constantes cinéticas α_{ij} , (3.24) son

$$\alpha_{11} = -0,0012s^{-1}$$

$$\alpha_{21} = 0,0012s^{-1}$$

$$\alpha_{12} = \alpha_{22} = 0,0s^{-1}$$

- Velocidad de deposición seca

$$Vd_{SO_2} = 0,0044m/s$$

$$Vd_{H_2SO_4} = 0,0026m/s$$

- Velocidad de deposición húmeda

$$Vd_{SO_2} = 0,28m/s$$

$$Vd_{H_2SO_4} = 0,14m/s$$

Hemos seleccionado tres casos para analizar.

4.3.1. Caso I

En este caso hemos tomado como contaminación inicial, el modelo de pluma Gaussiano, la emisión $EE = 0$ y la velocidad de emisión es nula.

$$CC(x, y, z) = EE0 \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{x - x_0}{\sigma_x} \right)^2 + \left(\frac{y - y_0}{\sigma_y} \right)^2 + \left(\frac{z - z_0}{\sigma_z} \right)^2 \right] \right\}$$

donde la emisión inicial $EE0 = 5Kg/s$, $\sigma_x = \sigma_y = 500$ y $\sigma_z = 50$, (x_0, y_0, z_0) son las coordenadas de la ubicación de la chimenea.

4.3.2. Caso II

En este caso el contaminante inicial es igual a cero y la emisión igual a la pluma de Gauss.

4.3.3. Caso III

En este caso es considerada la emisión desde una fuente puntual $EE = 5$ y la contaminación inicial es igual a cero.

Conclusiones

Se presenta en este trabajo un modelo de masa consistente para la obtención de campos de viento en dominios tridimensionales. La utilización de coordenadas conformes al terreno permite una construcción sencilla de la malla correspondiente al dominio correspondiente al problema planteado, ya que éste se ha reducido a un cubo unitario.

Si bien el espaciado vertical variable conduce en general a esquemas de orden menor que dos, la elección adecuada del mismo puede evitar este inconveniente. Aunque el sistema de ecuaciones resultante es no simétrico, se han obtenido resultados satisfactorios con la utilización del Bi-CGSTAB preconditionado con $ILLU(0)$.

La utilidad de éste modelo de diagnóstico para el ajuste de campos de viento se ha mostrado con un experimento real en la isla de La Palma. El modelo permite la generación de mapas de viento con medidas obtenidas a partir de pocas estaciones. Evidentemente, cuanto mayor sea el número de estaciones más precisos serán los resultados. Esta información es muy importante para localizar las áreas y épocas de mayor potencial de viento, con el objetivo de situar un parque eólico. Actualmente existe un pequeño parque eólico en la zona de *Manchas Blancas*.

Este trabajo de investigación debe ampliarse aún más para el ajuste del mo-

delo mediante la selección adecuada de constantes como los módulos de precisión de Gauss, ε , γ . Por el momento, hemos obtenido algunos resultados preliminares de estos parámetros usando algoritmos genéticos.

También se ha desarrollado un modelo de transporte de contaminantes en la atmósfera que aproxima la evolución de la concentración de dos familias de contaminantes en nuestro caso NO_x , HNO_3 y SO_2 , H_2SO_4 .

La formulación propuesta para el problema de convección-difusión-reacción planteado por este modelo proporciona interesantes propiedades de consistencia y estabilidad.

Este modelo pronóstico puede simular todo un episodio real de contaminación para las especies consideradas.

Líneas Futuras

Bibliografía

- [1] Axelsson, O. (1988). A restarted version of a Generalized Preconditioned Conjugate Gradient Method, *Com. Appl. Num. Meth.*, v. 4, pp. 521-530.
- [2] Barnard, J.C., Wegley, H.L., Hiester, T.R. (1987). Improving the performance of mass consistent numerical models using optimization techniques, *J. Climate. Appl. Meteorol.*, v. 26, pp. 675-686.
- [3] Brodzinski, R., Cantrel B.K., Endlinch, R.M. and Bhumralkar, C.M. (1982). Atmospheric Science Centre, SRI Int., Meudo Park Ca. U.S.A.
- [4] Businger, J.A., Arya, S.P.S. (1974). Heights of the Mixed Layer in the Stable, Stratified Planetary Boundary Layer. *Adv. Geophys*, pp. 73-92.
- [5] Carmichael, G.R. and Peters, L.K. (1980). Applications of the Sulfur Transport Eulerian Model (STEM) to a Superdata Set. University of Iowa City.
- [6] Codina, R. (1988). Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-reaction equation, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engg*, v. 156.
- [7] Codina, R. (2000). On stabilized finite element methods for linear systems of convection-diffusion-reaction equations, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engg*, v. 188, pp. 61-82.

-
- [8] Davis, C.G., Bunker, S.S., Mutschlecner, J.P. (1984). Atmospheric Transport Models for Complex Terrain, *J. Climate. Appl. Meteorol.*, v. 23, pp. 235-238.
- [9] Donea, J. (1984). A Taylor-Galerkin method for convective transport problems, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 20, pp. 101-119.
- [10] Donea, J., Givliani, S., Laval, H., Quartapelle, L. (1984). Time-accurate solution of advection-diffusion problems, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engg*, v. 45, pp. 123-146.
- [11] Donea, J., and Quartapelle, L. (1992). An introduction to finite element methods for transient advection problems, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engg*, v. 95, pp. 169-203.
- [12] Donea, J., Roig, B., and Huerta, A. (1988). High Order Accurate Time-Stepping Schemes for Convection-Diffusion Problems, Technical Report 42, CIMNE.
- [13] Donea, J., Roig, B., and Huerta, A. (2000). High Order Accurate Time-Stepping Schemes for Convection-Diffusion Problems, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engg*, v. 182, pp. 249-275.
- [14] Donea, J., Roig, B., and Huerta, A. (2001). Time Accurate Solution of Convective Transport Problems, *Comput. Meths. Appl. Mech. Engg*, submitted (2001).
- [15] Draxler, R.R. (1976). Determination of atmospheric diffusion parameters. *Atmos. Environ.*, v. 10, pp. 99-105.
- [16] Ferragut, L., Montero, G., Winter, G., Montenegro, R. (1990). Wind field adjustment: resolution by adaptive mixed finite element and multigrid algo-

- rithm. Applications, en *European Community Wind Energy Conference, Proceedings of an International Conference*, Madrid, H.S. Stephens & Associates, pp. 140-144.
- [17] Fletcher, R. (1976). Conjugate gradient methods for indefinite systems, *Lectures Notes in Math.*, v. 506, pp. 73-89.
- [18] Focken, U., Lange, M., Waldl, H.P. (2001). Previento- A Wind Power Prediction System with an Innovative Upscaling Algorithm. Helm, P., and Zervos, A., eds. : Proceeding of the European Wind Energy Conference, Copenhagen.
- [19] Focken, U., Lange, M., Waldl, H.P. (2001). Reduction of wind power prediction error by spatial smoothing effects. Helm, P., and Zervos, A., eds. : Proceeding of the European Wind Energy Conference, Copenhagen.
- [20] Focken, U., Heinemann, D., Waldl, H.P. (1999). Wind assessment in complex terrain with the numeric model Aiolos-implementation of the influence of roughness changes and stability. Proc. European Wind Energy Conference, Nice, pp. 1173-1176.
- [21] Geai, P. (1985). Methode d'interpolation et de reconstitution tridimensionnelle d'un champ de vent: le code d'analyse objective MINERVE, Technical Report DER/HE/34-87. 03, EDF chatou, France.
- [22] Graziani, G. (1994). Survey of long range transport models, en *Environmental Modeling Vol. II, Computer Methods and Software for Simulating Environmental Pollution and its Adverse Effects*, P. Zannetti, Ed., pp. 103-142.
- [23] Hestenes, M.R., Stiefel, E. (1952). Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *Jour. Res. Nat. Bur. Standards*, v. 49, 6, pp. 409-436.

- [24] Irwin, J.S. (1979). Estimating plume dispersion-A recommended generalized scheme. Presented at 4th AMS Symposium on Turbulence and Diffusion, Reno, Nevada.
- [25] Jennings, A., Malik, G.M. (1978). The solution of sparse linear equations by conjugate gradient method, *Int. Jour. Num. Meth. Eng.*, v. 12, pp. 141-158.
- [26] Kitada, T., Kaki, A., Veda, H., Peters LK. (1983). Estimation of vertical air motion from limited horizontal wind data- A numerical Experiment. *Atmos. Environ*, v. 17, pp. 2181-2192.
- [27] Lalas, D.P., Trombou, Lalas, M., Petrakis, M. (1988). Comparison of the performance of some numerical wind energy siting codes in rough terrain, in : European Community Wind Energy Conference, Herning Denmark.
- [28] Lalas, D.P., Ratto, C.F. (1996). Modelling of Atmospheric Flow Fields. World Scientific Publishing, Singapore.
- [29] Lange, M., Waldl, H.P. (2001). Assessing the uncertainty of wind power predictions with regard to specific weather situations. Helm, P., and Zervos, A., eds. : Proceeding of the European Wind Energy Conference, Copenhagen.
- [30] Lange, M., Hojstrup, Larsen, S., Barthelmie. (2001). Evaluation of models for the vertical extrapolation of wind speed measurement at offshore sites. EWEA special topic conference on wind power Brussels.
- [31] Lange, M., Hojstrup, Larsen, S., Barthelmie. (2001). Comparison of sea surface roughness models for offshore wind power utilisation. EWEA special topic conference on wind power Brussels.

- [32] Lax, P.D., Wendroff, B. (1960). Systems of conservative laws, *Comm. Pure Appl. Math.*, 13, pp. 217-237.
- [33] Martin, G. (1991). Methodes de preconditionnement par factorisation incomplete, *Memoire de Maitrise*, Universite Laval, Quebec, Canada.
- [34] Mata, L.J., García, R., Santana, R. (1994). Simulating acid deposition in tropical regions, en *Air Pollution II Volume 2: Pollution Control and Monitoring*, J.M. Baldasano, C.A. Brebbia, H. Power y P. Zannetti, Eds., Comput. Mech. Publ., Boston, pp. 59-67.
- [35] McMahon, T.A., Denisson, P.J. and Fleming, R.A. (1976). Long Distance Air Pollution Transportation Model Incorporating Washout and Dry Deposition Components. *Atm. Env.*, v. 10, pp. 751.
- [36] McRae, G.J., Goodin, W.R., Seinfeld, J.H. (1982). Development of a second generation mathematical model for urban air pollution I. Model formulation. *Atm. Env.*, v. 16, 4, pp. 679-696.
- [37] Montero, G., Montenegro, R., Escobar, J.M. (1997). A 3-D diagnostic model for wind field adjustment, a aparecer en *2nd European & African Conference on Wind Engineering (2 EACWE)*, Génova.
- [38] Montero, G., Suárez, A. (1995). Left-Right preconditioning versions of BCG-like methods, *Neural, Parallel & Scientific Computations*, v. 3, 4, pp. 487-501.
- [39] Montero, G., Suárez, A. (1996). Efecto del preconditionamiento y reordenación en los métodos CGS y BI-CGSTAB, en *Proceeding del III Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería*, Zaragoza, pp. 1306-1315.

- [40] Montero, G., Montenegro, R., Escobar, J.M. (1998). A 3-D Model for Wind Field Adjustment. *J. Wind. Eng. and Ind. Aerd.*, v. 76-46, pp. 249-261.
- [41] Montero, G., Sanín, N. (2001). Modelling of Wind Field Adjustment Using Finite differences in a Terrain Conformal Coordinate System. *J. Wind. Eng. and Ind. Aerd.*, v. 89, pp. 471-488.
- [42] Montero, G., Winter, G., Cuesta, P. (1993). Numerical model of atmospheric pollutant transport, en *Vol. III Air-Wastes-Miscellany, Proc. of Chemical Industry and Environment*, Girona, Ed. Univ. Pol. Catalunya, Univ. and Soc. Cat. de Tecn., pp. 21-28.
- [43] Montero, G., Rodriguez, E., Montenegro, R., Escobar, J.M., Gonzáles-Yuste, J.M., Parameter estimation in a 3-D wind adaptive model using GAs——
——
- [44] Moussiopoulus, N., Flassak, Th., Knittel, G. (1988). A Refined Diagnostic Wind Model, *Environ. Software.*, v. 3, pp. 85-94.
- [45] Palomino, I., Martín, F. (1995). A simple method for spatial interpolation of the wind in complex terrain. *J. Appl. Meteor.*, 34, pp. 1678-1693.
- [46] Panofsky, H.A., Dutton, J.A. (1984). Atmospheric Turbulence, Models and Methods for Engineering Applications. John Wiley, New york.
- [47] Pasquill, F. (1976). Atmospheric dispersion parameters in Gaussian plume modeling; part 2, Possible requeriments for change in the Turner Workbook values. U.S. EPA Document EPA-600/4-76-030b, Washinton, D. C.
- [48] Phillips, P., and Panofsky H.A. (1982). A reexamination of lateral dispersion from continuous sources. *Atmos. Environ.*, v. 16, pp. 1851-1859.

- [49] Ratto, C.F. (1996). The AIOLOS and WINDS Codes. In Lalas, D.P. Ratto, C.F. (eds), *Modelling of Atmospheric Flow Fields*. Word Sci. Singapore, pp. 421-431.
- [50] Ratto, C.F., Festa, R., Nicora, O., Mosiello, R., Ricci, A., Lalas, D.P., Frumentto, O.A. (1990). Wind field numerical simulation a new userfriendly code, In: Palz, W., editor, *Resource assessment*. European Community Wind Energy Conference, H.S. Stephens & Associates, Madrid.
- [51] Roig, B. (2001). Métos numéricos para la integración temporal de alto orden en problemas de convección-difusión. Tesis Doctoral, Universitat politécnica de Catalunya, Departamento de Matemática aplicada III, Directores Huerta, A., Donea, J.M.
- [52] Rodriguez, E., Montero, G., Montenegro, R., Escobar, J.M., and González-Yuste, J.M. (2002). Parameter Estimation in a Three-dimensional Wind Field Model Using Genetic Algorithms, in: Sloom, P., Kenneth, C.J., Dongarra, J.J., Huekstra, A.G., Editors,. *Computational Science-ICCS 2000*, International Conference. Amsterdam, The Netherlands, Proceedings.
- [53] Ross, D.G., Smith, I.N., Manins, P.C., Fox, D.G. (1988). Diagnostic Wind Field Modeling for Complex Terrain: Model Development and Testing. *J. Appl. Meteorol.*, v. 27, pp. 785-796.
- [54] Saad, Y. (1996). *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, PWS Publ. Comp., Boston.
- [55] Sanín, N., Montero, G. (1999). Construcción de un modelo tridimensional para ajuste de campos de viento mediante diferencias finitas. *Proc. of the CEDYA'99*, eds. R. Montenegro, G. Montero & G. Winter, Publications

- of Las Palmas de Gran Canaria University: Las Palmas de Gran Canaria, pp.1603-1612.
- [56] Sanín, N., Montero, G. (2000). A 3-D high-order accurate time-stepping scheme for air pollution modelling. Proc. of the International Conference on Modelling and Simulation MS'2000, eds. Berriel, R., Hernández, V., Montenegro, R., Rocha, J., University of Las palmas de Gran Canaria, pp. 443-451.
- [57] Sanín, N., Montero, G. (2001). Un esquema de alto orden en tiempo para la modelización 3-D del transporte de contaminantes en la atmósfera, Proc. Cedyá 2001, eds. Ferragut, L., Santos, A. Salamanca.
- [58] Seinfeld, J.H. (1986). *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*, John Wiley & Sons, New York.
- [59] Selmin, V., Donea, J., Quatrapelle, L. (1985). Finite element method for non-linear advection, *Comp. Meth. Appl. Mech.*, 52, pp. 817-845.
- [60] Sempreviva, A.M., (1996). Roughness Changes: Response of neutral boundary layers. In Lalas, D.P. Ratto, C.F. (eds), *Modelling of Atmospheric Flow Fields*. Word Sci. Singapore, pp. 213-245.
- [61] Shadid, J.N., Tuminaro, R.S. (1994). A comparison of preconditioned nonsymmetric Krylov methods on a large-scale MIMD machine, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, v. 15, 2, pp. 440-459.
- [62] Sherman, C.A. (1978). A mass-consistent model for wind fields over complex terrain. *J. Appl. Meteorol.*, v. 17, pp. 312-319.

- [63] Sommeijer, B.P., and Kok, J. (1995). Implementation and performance of the time integration of a 3D numerical transport model, *Int. J. Num. Meths. Fluids.*, v. 20, pp. 213-231.
- [64] Sonneveld, P. (1989). CGS: a fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, v. 10, pp. 36-52.
- [65] Suárez, A, García, D., Flórez, E., Montero, G. (1997). Preconditioning Krylov methods, a aparecer en *NATO ASI SERIES book*, Kluwer Academic Publishers.
- [66] Tombrou, M., Lalas, D.P. (1990). A telescoping procedure for local wind energy potencial assessment, in: Palz, W., editor, Resource assessment. European Community Wind Energy Conference, H.S. Stephens & Associates, Madrid.
- [67] van der Vorst, H.A. (1990). The convergence behaviour of preconditioned CG and CG-S in the presence of rounding errors, *Lect. Notes in Math.*, v. 1457, pp. 126-136.
- [68] van der Vorst, H.A. (1992). BI-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, v. 13, pp. 631-644.
- [69] Warming, R.F., and Hyett, B.J. (1974). The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite-difference method, *J. Comput. Phys.*, v. 14, pp. 159-179.
- [70] Wyngord, J.C, Coté, O.R, and Rao, K.S, (1974). Modeling the Atmospheric Boundary layer, in: *Advances in Geophysics*, v. 18A, Academic Press, New York, pp. 193-212.

- [71] Winter, G., Montero, G., Cuesta, P.D., Galán, M., Macías, A. (1994). On numerical simulation of a crossflow moving bed heat exchanger: an unified numerical method and applications, en *Congreso Europeo de Fluidización*, A. Macías y G. Winter (Eds.), Las Palmas de Gran Canaria, pp. 241-250.
- [72] Winter, G., Montero, G., Ferragut, L., Montenegro, R. (1995). Adaptive strategies using standard and mixed finite elements for wind field adjustment. *Solar Energy*, v. 54, 1, pp. 49-56.
- [73] Yu, C.C., Heinrich, J.C. (1987). Petrov-Galerkin method for multidimensional, time dependent convective diffusion equations, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 24, pp. 2201-2215.
- [74] Zannetti, P. (1990). *Air Pollution Modeling*. Comput. Mech. Publ., Boston.

Glosario

Acimut: Ángulo que con el meridiano forma un círculo vertical que pasa por un punto de la esfera celeste o del globo terráqueo.

Adiabático: El recinto entre cuyo interior y exterior no es posible el intercambio térmico. Dícese de la transformación termodinámica que un sistema experimenta sin que haya intercambio de calor con otros sistemas.

Advección: Transferencia de calor debida al movimiento horizontal de un flujo tal como el aire o el agua.

Aerosol: Dispersión coloidal en un medio gaseoso de un líquido o un sólido, en partículas de escala casi molecular.

Antropogénicas:

Barlovento:

Calentamiento global: Véase **efecto invernadero**

Coloide: Vocablo con que se designa la dispersión de una sustancia que se pre-

senta en forma de partículas cuyo diámetro oscila entre una milimicra y una micra, sean o no moleculares. Entre sus propiedades está la de no difundir a través de las membranas de pergamino y la de presentar el efecto de Tyndall. Puede presentarse en estado líquido, sólido gelatinoso según la concentración y la temperatura.

Conducción: Proceso mediante el cual el calor se transfiere a través de la materia sin que se produzca la transferencia de la materia misma.

Convección: Transferencia de calor producida por el movimiento masivo de un fluido tal como el aire o el agua.

Derenaje: Operación que consiste en facilitar el paso de agua en un terreno húmedo.

Drenaje Térmico:

Difusión:

Efecto Invernadero: Capacidad de la atmósfera (nubes, vapor de agua y en un menor grado, gases atmosféricos tales como dióxido de carbono) para absorber la radiación de onda más larga emitida por la tierra. El efecto invernadero es un fenómeno que ocurre de manera natural y permite que la superficie terrestre se caliente más que lo que se calentaría en ausencia de la atmósfera. Algunos científicos creen que las crecientes emisiones de dióxido de carbono y metano provocadas por el hombre durante la combustión de combustibles fósiles

incrementarán la magnitud del efecto invernadero, lo cual aumentará la temperatura en la atmósfera. Este fenómeno se conoce como calentamiento global.

Estratosfera: La segunda capa más baja de la atmósfera, que se inicia a una altitud de aproximadamente $12Km$ y termina a una altitud de aproximadamente $50Km$. En la estratosfera se encuentra la capa de ozono, que protege a la tierra de la radiación ultravioleta del sol.

Fotoquímico:

Frente: Límite entre dos masas de aire con diferentes características de humedad y temperatura.

Gradiente Vertical: Gradiente en el cual la temperatura del aire cambia con la altura. El verdadero gradiente vertical de la atmósfera es aproximadamente -6 a $-7^{\circ}C/Km$

Inmisión:

Inversión de la Temperatura: Condición atmosférica en que la temperatura se incrementa con la altitud.

Isobaras: Líneas que conectan puntos de igual presión.

Isotropía: Cantidad de isotropo

Isótropo: Dícese de un cuerpo cuando tiene las mismas propiedades en todas las direcciones.

Masa de Aire: Volumen de aire relativamente homogéneo con respecto a la temperatura y a la humedad, que adquiere las características de la región donde se forma y viaja.

Modelo Físico: Modelo que requiere el uso de un túnel de viento u otra instalación de modelos de fluidos. El modelo físico puede ser útil para estudiar situaciones complejas de flujo tales como condiciones de edificios, terreno o flujo descendente de la chimenea.

Orografía:

Porción de Aire: Cuerpo de aire relativamente bien definido que no se mezcla fácilmente con el aire circundante.

Precipitación: Agua procedente de la atmósfera que en forma sólida o líquida se deposita sobre la superficie de la tierra.

Precipitación Húmeda: Remoción de contaminantes particulados del aire mediante precipitación.

Precipitación Seca: Remoción de contaminantes particulados del aire a través de la sedimentación gravitacional.

Sedimentación: Asentamiento en el fondo de un recipiente de partículas sólidas que se hallan en el seno de un líquido.

Sedimentación Gravitacional:

Stiffnes:

Sotavento:

Teoría *K*:

Topografía: Características físicas de la superficie terrestre tales como, terreno plano o presencia de montañas y valles. La topografía influye en la manera como la tierra y su aire circundante se calientan, así como en la manera en que fluye el aire.

