Una vez hecha esta discretización espacial y definiendo C_j (t)= C($j\Delta z,t$), el error local de truncamiento espacial de la aproximación es de O((Δz)^2). La ecuación (1.16) discretizada, se escribe

$$R\left(\frac{dC_j}{dt}\right) = \frac{D}{(\Delta z)^2}\left(C_{j+1} - 2C_j + C_{j-1}\right) - \frac{v}{2\Delta z}\left(C_{j+1} - C_{j-1}\right) - RkC_j - D\left[\frac{(\Delta z)^2}{12}\frac{\partial^4 C(t,\zeta_j)}{\partial z^4}\right] v\left[\frac{(\Delta z)^2}{6}\frac{\partial^3 C(\zeta_j,t)}{\partial z^3}\right],$$

$$j = 1, \ldots, L, \qquad (1.24)$$

$$\text{con } \zeta_j \in \left[z_{j-1}, z_{j+1}\right].$$

Ahora definamos c_j (t) como la solución del sistema de ecuaciones

$$R\left(\frac{dc_j}{dt}\right) = \frac{D}{(\Delta z)^2}\left(c_{j+1} - 2c_j + c_{j-1}\right) - \frac{v}{2\Delta z}\left(c_{j+1} - c_{j-1}\right) - Rkc_j\,, \qquad (1.25)$$

$$\text{Con } j = 1, \ldots, L.$$

Lo que se espera es que cuando (Δz) sea suficientemente pequeño se cumpla que cj (t) ≅ C(t, $j\Delta z$).

Luego, con podemos aproximar la ecuación (1.16) de la siguiente manera:

$$\frac{dc_j}{dt} = \frac{D}{R\Delta z^2}\left(c_{j+1} - 2c_j + c_{j-1}\right) - \frac{v}{2R\Delta z}\left(c_{j+1} - c_{j-1}\right) - kc_j. \qquad (1.26)$$

Llamando

$$\alpha = \frac{D}{R\Delta z^2}, \quad \beta = \frac{v}{2R\Delta z},$$

La ecuación (1.26) puede escribirse de forma más simplificada como

$$\frac{dc_j}{dt} = \alpha\left(c_{j+1} - 2c_j + c_{j-1}\right) - \beta\left(c_{j+1} - c_{j-1}\right) - kc_j = (\alpha+\beta)c_{j-1} - (2\alpha+k)c_j + (\alpha-\beta)c_{j+1}. \qquad (1.27)$$

Reemplazando j=1 en la ecuación (1.27), se obtiene

$$\frac{dc_1}{dt} = (\alpha+\beta)c_0 - (2\alpha+k)c_1 + (\alpha-\beta)c_2,$$

Análogamente, para valores de e j = 2 en la ecuación (1.27),

$$\frac{dc_2}{dt} = (\alpha+\beta)c_1 - (2\alpha+k)c_2 + (\alpha-\beta)c_3. \qquad (1.28)$$

Evaluando sucesivamente los diferentes valores de j en la ecuación (1.27), se llega al último valor, es decir, $j = L$-1,

$$\frac{dc_{L-1}}{dt} = (\alpha+\beta)c_{L-2} - (2\alpha+k)c_{L-1} + (\alpha-\beta)c_L. \qquad (1.29)$$

Se obtiene de esta forma un conjunto de L-2 ecuaciones diferenciales ordinarias, que no son suficientes para determinar las incógnitas del problema para la solución aproximada en los nodos de la malla espacial.

Para cerrar el sistema utilizamos las condiciones de contorno, dadas por las ecuaciones (1.21) y (1.22). Al discretizar las derivadas con una fórmula de diferencias centradas en la frontera, van a aparecer valores de la solución en los nodos -1 y L+1, c_{-1} y c_{L+1}, dichos nodos deben ser agregados a la malla (denominados nodos ficticios) y evaluar la ecuación diferencial en los nodos 0 y L.

Mediante la aplicación del método de diferencias finitas, que por espacio no se detalla, se obtiene el sistema de ecuaciones diferenciales con incógnitas

$$\frac{dc_0}{dt} = \delta c_0 - 2\alpha c_1$$

$$\frac{dc_j}{dt} = (\alpha+\beta)c_{j-1} - (2\alpha+k)c_j + (\alpha-\beta)c_{j+1},$$

$$j = 1, \ldots, L-1$$

$$\frac{dc_L}{dt} = 2\alpha c_{L-1} - (\alpha+k)c_L, \qquad (1.30)$$

Si se introduce el vector c, podemos escribir el sistema de ecuaciones (1.30) en forma matricial

$$\vec{c} = \begin{bmatrix} c_0 \\ \vdots \\ \square \\ \square \\ \square \\ \vdots \\ c_L \end{bmatrix}, \frac{d\vec{c}}{dt} =$$

$$\begin{bmatrix} \delta & 2\alpha & 0 & \square & \square & \square & 0 \\ (\alpha+\beta) & -(2\alpha+k) & (\alpha-\beta) & \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \ddots & \ddots & \ddots & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square & (\alpha+\beta) & -(2\alpha+k) & (\alpha-\beta) \\ 0 & \square & \square & \square & 0 & 2\alpha & -(2\alpha+k) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ \vdots \\ \square \\ \square \\ \square \\ \vdots \\ c_L \end{bmatrix}$$

Que en forma compacta se representa por

$$\frac{d\vec{c}}{dt} = M\vec{c}.$$

B. Esquema explícito

Para encontrar una discretización completa de esta ecuación necesitamos discretizar también la variable temporal o utilizar un método para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que hemos planteado. Comencemos por simplicidad considerando el esquema explícito utilizando el método de Euler [10] y realizando una discretización directa de la derivada temporal por medio de la fórmula de diferencias adelantadas,

$$\frac{dc_j(t)}{dt} = \frac{c_j\big((n+1)\Delta t\big) - c_j(n\Delta t)}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2}\frac{d^2 c_j}{dt^2}\bigg|_{\zeta_n},$$

Donde . $\zeta_n \in [n\Delta t, (n+1)\Delta t]$.

Por tanto, la ecuación (1.24) se escribe,

$$R\left(\frac{c_j\big((n+1)\Delta t\big) - c_j(n\Delta t)}{\Delta t}\right) = \frac{D}{(\Delta z)^2}\Big(c_{j+1}(n\Delta t) - 2c_j(n\Delta t) + c_{j-1}(n\Delta t)\Big) - \frac{v}{2\Delta z}\Big(c_{j+1}(n\Delta t) - c_{j-1}(n\Delta t)\Big) - Rkc_j(n\Delta t),$$

Es decir,

$$R\left(\frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t}\right) = \frac{D}{(\Delta z)^2}\left(c_{j+1}^n - 2c_j^n + c_{j-1}^n\right) - \frac{v}{2\Delta z}\left(c_{j+1}^n - c_{j-1}^n\right) - Rkc_j^n.$$

Evidentemente, esperamos que se satisfaga y, por lo tanto, al resolver las ecuaciones discretas anteriores estamos construyendo aproximaciones a la solución de la ecuación original en derivadas parciales.

Al introducir $\alpha = \frac{D}{R\Delta z^2}$, $\beta = \frac{v}{2R\Delta z}$, se tiene el sistema en diferencias del método explícito:

$$\begin{aligned} c_0^{n+1} &= c_0^n + \Delta t(\delta c_0^n - 2\alpha c_1^n) \\ c_j^{n+1} &= c_j^n + \Delta t(\alpha+\beta)c_{j-1}^n - \Delta t(2\alpha+k)c_j^n \\ &\quad + \Delta t(\alpha-\beta)c_{j+1}^n \\ j &= 1,\ldots,L-1 \\ c_L^{n+1} &= c_L^n + \Delta t(2\alpha c_{L-1}^n - (2\alpha+k)c_L^n). \end{aligned}$$

En forma matricial, se puede escribir como

$$\vec{c}^{\,n+1} = \vec{c}^{\,n} + \Delta t M \vec{c}^{\,n},$$

A. Esquema implícito

Los esquemas explícitos tienen un coste computacional pequeño en cada paso de tiempo, pero, para ser estables, es necesario trabajar con incrementos de tiempo también pequeños. Un análisis de estabilidad para esquemas explícitos [11], a partir de la teoría de las características para soluciones continuas, lleva a la conclusión que dichos esquemas, para ser estables, deben cumplir la condición de Courant. Dicho lo anterior, debido a que los esquemas explícitos presentan problemas de estabilidad no sólo por el tamaño de paso de discretización, sino por la relación $\frac{\Delta t}{(\Delta z)^2} = r$,donde es llamado el número de Courant, es decir, para algunos valores de Δz y Δt, para evitar este tipo de problemas se pueden utilizar los métodos implícitos. Se tiene el sistema en diferencias del método implícito,

$$c_0^n = c_0^{n+1} - \Delta t(\delta c_0^{n+1} - 2\alpha c_1^{n+1})$$

$$\begin{aligned} c_j^n &= c_j^{n+1} - \Delta t(\alpha+\beta)c_{j-1}^{n+1} + \Delta t(2\alpha+k)c_j^{n+1} \\ &\quad - \Delta t(\alpha-\beta)c_{j+1}^{n+1} \end{aligned}$$

$$j = 1,\ldots,L-1$$

$$c_L^n = c_L^{n+1} + \Delta t(2\alpha c_{L-1}^{n+1} - (2\alpha+k)c_L^{n+1}).$$

Lo que se puede evidenciar ahora es que calcular los valores en un punto del espacio y en un instante de tiempo implica utilizar los valores de en otros puntos del espacio en el mismo instante, por lo que se debe resolver en cada paso de tiempo un sistema de ecuaciones que engloba las variables en todos los puntos del espacio en $c_j^{n+1}, j = 0, \ldots, L$.

El esquema implícito es de la forma,

$$(I - \Delta t M)\bar{c}^{n+1} = \bar{c}^{n},$$

Los esquemas implícitos tienen la ventaja sobre los esquemas explícitos que son incondicionalmente estables independientemente de los pasos y elegidos.

D. Esquema de Crank-Nicholson

Otra posibilidad, si se quiere aproximar la derivada temporal con mayor precisión, es utilizar la regla de medio paso implícita para resolver el sistema de ecuaciones semidiscreto, así obtenemos el denominado esquema de Crack-Nicholson [9], [12] para la ecuación de convección-dispersión

$$\begin{aligned} R\left(\frac{c_j^{n+1} - c_j^{n}}{\Delta t}\right) = & \frac{D}{2}\left(\frac{c_{j+1}^{n+1} - 2c_j^{n+1} + c_{j-1}^{n+1}}{\Delta z^2}\right) \\ & + \frac{D}{2}\left(\frac{c_{j+1}^{n} - 2c_j^{n} + c_{j-1}^{n}}{\Delta z^2}\right) \\ & - \frac{v}{2}\left(\frac{c_{j+1}^{n+1} - c_{j-1}^{n+1}}{2\Delta z} + \frac{c_{j+1}^{n} - c_{j-1}^{n}}{2\Delta z}\right) \\ & - \frac{Rk}{2}\left(c_j^{n+1} + c_j^{n}\right). \end{aligned}$$

Como la regla de medio paso implícita tiene un error de truncación de orden $O((\Delta t)^2)$, se mejora el comportamiento respecto a los esquemas anteriores que eran de orden $O((\Delta t)$, por lo cual, el error de truncación del esquema de Crank-Nicholson es

$$\tau = O((\Delta t)^2 + (\Delta z)^2).$$

El esquema de Crank-Nicholson es de la forma

$$\left(I - \frac{\Delta t}{2} M\right)\bar{c}^{n+1} = \left(I + \frac{\Delta t}{2} M\right)\bar{c}^{n},$$

El esquema de Crank-Nicholson es incondicionalmente estable [12], [13], independientemente de los pasos Δz y Δt elegidos.

IV. RESULTADOS NUMÉRICOS DE LA ECUACIÓN CONVECCIÓN-DISPERSIÓN

En este apartado se presentan los resultados numéricos obtenidos con los esquemas explícito e implícito. Para la simulación numérica que se presentan en este capítulo, se utilizan los valores de los parámetros que se presentan en la Tabla 1 [6]. Que constituyen un problema típico de transporte de pesticida en un columna de suelo. Esto permitirá evaluar el funcionamiento de los métodos propuestos en este tipo de problemas.

Tabla 1. Valores de los parámetros para las simulaciones [1]

Parámetro	Valor	Unidades
l	variable	m
K_{oc}	0.100	$m^3\ kg^{-1}$
T_{50}	100	d
θ	0.40	–
νθ	0.0125	$m\ d^{-1}$
D_0	4×10^{-5}	$m^2\ d^{-1}$
α	0.005	m
f_{oc}	0.01	–
ρ	1400	$kg\ m^{-3}$
κ	0.34	-

Fuente: Elaboración propia.

La Figura 2 muestra la simulación del modelo bajo los esquemas explícito e implícito, con $\Delta t = 0.05\ (dias)$, tiempo final T para 2, 5 y 20 días, $\Delta z = 0.0001\,m$ y el espesor de la capa añadida $l = 0.01\,m$. Como se puede evidenciar, los resultados varían levemente, sin embargo, el esquema implícito resulta ser estable para todo valor de los parámetros de discretización.