

Angel BALAGUER - Carlos CONDE - José A. LÓPEZ - Vicent MARTÍNEZ

INFLUENCIA DE LA APROXIMACIÓN INTEGRAL EN ESQUEMAS DE VOLUMENES FINITOS PARA SIMULAR EL PROCESO DE MIGRACIÓN DE SUSTANCIAS RADIATIVAS EN LA GEOSFERA

Artículo basado en el trabajo "Resolución numérica del problema unidimensional de transporte en la geosfera de residuos radiactivos", premio a la mejor tesina de 1995.

Un objetivo importante en los planes generales de residuos radiactivos se orienta hacia la reducción de la carencia en infraestructuras e instalaciones que todavía existe en temas relacionados con los residuos de alta actividad. La simulación de los distintos fenómenos que pueden sufrir los isótopos radiactivos puede jugar un papel fundamental en la elección de posibles emplazamientos para la localización de un futuro almacén. Este estudio adquiere gran importancia dado el elevado período de vida que dichos isótopos pueden tener, el cual puede ser muy superior al de las barreras de ingeniería que los aíslan de la geosfera.

Este trabajo pretende mostrar las ventajas e inconvenientes que presentan distintos códigos numéricos basados en el método de volúmenes finitos en la simulación del proceso de transporte de contaminantes radiactivos a través de un medio poroso y en una zona saturada de la geosfera. Dicho proceso puede ocurrir cuando el agua que puede circular por el subsuelo entra en contacto con los isótopos radiactivos almacenados en un depósito subterráneo y se produce una disolución y posterior arrastre de los mismos. Parte del trabajo que se expone a continuación ha sido descrito en la Tesina de Licenciatura de Angel Balaguer Beser (véase Balaguer [1]), la cual ha obtenido el premio de la Sociedad Nuclear Española a la mejor tesina/proyecto fin de carrera presentada durante el curso académico 1993-1994.

En el modelo que aquí se considera se supone que los procesos que ocurren en la zona no saturada pueden modelizarse a través de un término fuente para la zona saturada. De este modo se limita el estudio a la zona saturada. Además

se considera un transporte de contaminantes en corrientes de agua subterránea con una extensión horizontal mucho mayor que la vertical, que hacen que dicho problema pueda modelizarse en un dominio horizontal en dos dimensiones, aunque teniendo en cuenta los promedios de concentraciones que se producen en sentido vertical. Se suponen contaminantes en pequeñas concentraciones que no alteran la densidad del agua en la que están disueltos y que no influyen de esta forma en la corriente de agua.

Los mecanismos de transporte que se consideran son los de convección, difusión molecular, dispersión hidrodinámica, reacciones reversibles de sorción, reacciones de desintegración, filiación radiactiva, reacciones químicas de primer orden entre los distintos isótopos radiactivos, junto con otro tipo de reacciones de precipitación-disolución que pueden representar la no conservación de materia en el balance de flujos. En el modelo que aquí se describe se supone que el campo de velocidades convectivas es conocido o se modeliza mediante otro modelo paralelo, acoplado con el modelo de transporte de contaminantes. Se considera una adsorción lineal isoterma que supone una relación lineal entre las concentraciones en las fases móvil e inmóvil para cada uno de los isótopos radiactivos. La modelización matemática del proceso de transporte difusivo se realiza mediante la ley de Fick (véase Bear [4]) mientras que en la dispersión hidrodinámica se considera el modelo propuesto por Bear, Batchman y Fried que supone una analogía con la modelización del fenómeno difusivo (puede consultarse Balaguer [1]).

No parece factible la obtención de la solución analítica de dicho modelo de transporte en mu-

chos problemas de interés práctico (por ejemplo transporte a través de un campo de velocidades heterogéneo), con lo cual hay que hacer uso de métodos numéricos para su resolución. La principal dificultad en la solución de dicho modelo radica en la mezcla entre la naturaleza parabólica e hiperbólica que poseen las ecuaciones del mismo.

Los métodos numéricos clásicos de resolución de las ecuaciones del transporte se enfrentan, entre otros, con los problemas de la difusión numérica, falsas oscilaciones, error de fase, errores en el pico y orientación del mallado que pueden aparecer en la solución cuando el gradiente de la misma alcanza un elevado valor entre pares de nodos. Falsas oscilaciones y difusión numérica tienden a excluirse entre sí, es decir, un esquema que resuelve el problema de falsas oscilaciones tiende a dar una excesiva difusión numérica (es el caso de esquemas clásicos de primer orden de tipo upwind basados en los métodos de elementos finitos y diferencias finitas) mientras que otros esquemas que resuelven el problema de la difusión numérica tienden a crear falsas oscilaciones (por ejemplo algunos esquemas de segundo o alto orden centrados de tipo lineal, véase Gray & Pinder [6]). Oscilaciones numéricas son a menudo las precursoras de inestabilidades mientras que una excesiva difusión numérica puede causar la no convergencia en problemas de tipo no lineal.

Recientemente se ha extendido el uso del método de volúmenes finitos en la resolución de distintos problemas prácticos. Una de las ventajas que posee dicho método radica en que la discretización de los términos convectivo y difusivo-dispersivo envuelve sólo la frontera del

volumen de control. Sin embargo el nivel de precisión del mismo depende de la fórmula de cuadratura numérica utilizada así como de la técnica de interpolación definida y del tipo de aproximación usada en la parte convectiva. En este trabajo se presentan nuevas técnicas que mejoran el nivel de eficiencia de los esquemas clásicos de volúmenes finitos.

FORMULACIÓN GENERAL

El modelo de transporte de sustancias radiactivas en la geosfera con las suposiciones descritas en la introducción se puede expresar a través del siguiente sistema de ecuaciones en derivadas parciales y acopladas (véase Balaguer [1]):

$$\frac{\delta (a_i u_i)}{\delta t} + \nabla \cdot (\vec{v} u_i) - \nabla \cdot (K \cdot \nabla u_i) + Q_i u_i - \sum_{k \neq i} \Gamma_{k \rightarrow i} u_k = f_i \quad (1)$$

$$i=1, \dots, NE, \quad \forall (x,y) \in \Omega, \quad \forall t \in [0, T]$$

donde $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ es el dominio espacial considerado. " $u_i(x,y,t)$ " $\forall i=1, \dots, NE$ son las funciones incógnitas y representan la concentración de cada isótopo " i ", siendo NE el número de radionúclidos presentes que es igual al número de ecuaciones a resolver. El resto de funciones que aparecen en (1) se suponen conocidas y vienen dadas por cada uno de los fenómenos fisicoquímicos considerados. Destacan por su importancia en los errores numéricos el vector $\vec{v}(x,y,t) = (v_x(x,y,t), v_y(x,y,t))$, que procede de la modelización del fenómeno convectivo, y el tensor de dispersión

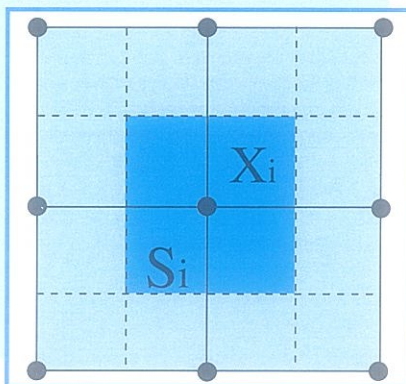
$$K(x,y,t) = \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{pmatrix}$$

$a_i(x,y,t)$ es el factor de retención y es independiente de la concentración de contaminantes dado que se supone una adsorción lineal isoterma.

El método de volúmenes finitos consiste en integrar cada ecuación en derivadas parciales de (1) en los denominados volúmenes de control y aproximar las integrales resultantes por medio de alguna técnica numérica. Se supone que Ω es un rectángulo. Sobre Ω se define entonces un mallado formado por rectángulos de lados para-

lelos a los ejes de coordenadas (figura 1). Por simplicidad se suponen todos ellos con lados de igual longitud, Δx , en la dirección del eje x , e Δy en la dirección del eje y . Cada rectángulo se divide en cuatro sub-rectángulos utilizando las líneas que unen el punto medio de cada uno de sus lados con el centro del rectángulo. A cada vértice x_i de cada rectángulo, se le asocia entonces un volumen de control definido como la unión de los sub-rectángulos que lo tienen como vértice (figura 2).

F II. Volumen de control, S_i



El uso del teorema de la divergencia posibilita la transformación de integrales sobre todo el volumen de control que integran los términos convectivo (sumando en el que interviene el vector $\vec{v}$) y difusivo-dispersivo (en el que interviene el tensor de dispersión K) de cada ecuación, en integrales sobre la frontera de cada volumen.

Para la integración temporal se ha elegido un θ esquema ($\theta \in [0,1]$, con $\theta = 0$ el esquema es explícito), con el objetivo de poder escoger incrementos de tiempo, Δt , superiores para mantener la estabilidad de los esquemas numéricos resultantes. En cada rectángulo de la malla se aproxima el valor de la solución por medio de una interpolación basada en los valores obtenidos en los cuatro vértices del mismo.

APROXIMACIÓN DE LA PARTE CONVECTIVA

Los errores numéricos se producen fundamentalmente cuando el valor de la solución sufre un importante cambio entre pares de nodos. En el análisis del comportamiento de un esquema numérico es preciso también tener en cuenta el número de Peclet, P_e , del problema en cada una de las direcciones ($P_e = \frac{v_x \Delta x}{K_{11}}$ en la dirección

del eje x , $P_e = \frac{v_y \Delta y}{K_{21}}$ en la dirección del eje y) y la aproximación utilizada para el término convectivo. Entre los esquemas que pueden usarse para esta última aproximación conviene destacar los tres siguientes: 1) Centrado, 2) Upwind, 3) Upwind parcial. Este último puede ser analizado como una combinación lineal de los dos primeros.

La aproximación integral más sencilla es la que en cada volumen de control utiliza el valor del

área del mismo multiplicada por el valor del integrando en el nodo, x_i , que tiene asociado dicho volumen de control. Las integrales sobre la frontera se aproximan entonces, en cada uno de los lados que la componen, por medio del producto del valor de la solución en el punto medio del mismo por su longitud.

La difusión numérica de las soluciones en los tres tipos de esquemas mencionados, aumenta entonces conforme el valor de θ crece hacia 1. Escogiendo el menor valor de θ por medio del cual el esquema es estable pueden aparecer oscilaciones en esquemas centrados. No ocurre lo mismo con los esquemas tipo upwind de primer orden, manteniendo el número de Courant del problema, $Cr = \frac{v_x \Delta t}{\Delta x}$

en la dirección del eje x , $Cr = \frac{v_y \Delta t}{\Delta y}$

en la dirección del eje y , por debajo de la unidad, o en el caso de esquemas tipo upwind parcial, utilizando una adecuada discretización espacial y temporal de modo que se verifique el principio del máximo discreto (véase Balaguer et al. [3]).

Sin embargo los esquemas tipo upwind y upwind parcial presentan una excesiva sensibilidad respecto a la relación entre los pasos de discretización, el valor de θ y los parámetros físicos del medio, en la obtención de soluciones precisas. Ello puede desaconsejar su elección en la simulación de procesos de transporte con flujos muy irregulares.

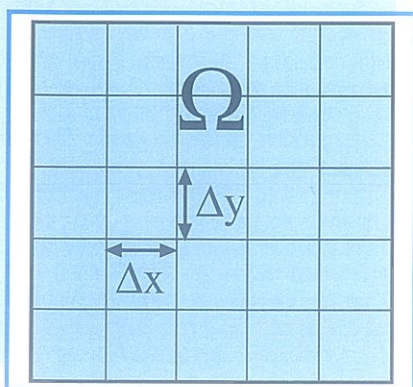
Manteniendo un valor de $\theta = 0.5$ el esquema numérico que produce resultados más precisos es el esquema centrado. Dicho esquema es de segundo orden respecto a la variable tiempo en el sentido del error de truncamiento local. Además las oscilaciones pueden decrecer a medida que aumenta el valor de tiempo en la simulación. Con dicho esquema es preferible, en cambio, el uso de fórmulas de cuadratura distintas de la utilizada en los esquemas descritos en este apartado.

OTROS TIPOS DE APROXIMACIÓN INTEGRAL

Dado que el mallado utilizado está formado por rectángulos de lados paralelos a los ejes, los volúmenes de control son también rectángulos y sobre ellos pueden utilizarse otras técnicas de aproximación para las integrales sobre la superficie de cada volumen de control. En este trabajo se analizan dos de ellas, las cuales se exponen a continuación.

La primera es una fórmula de cuadratura gaussiana con cuatro nodos. Las soluciones con ella obtenidas utilizando un esquema centrado y una interpolación con polinomio de grado 1 en cada una de las dos direcciones, con $\theta = 0.5$, muestran una mayor precisión que las obtenidas con el procedimiento de integración utilizado en el anterior apartado. Sin embargo los mejores resultados se obtienen cuando el número de Courant es menor que 0.5, en cada una de las dos direcciones. Además en cada uno de los cuatro lados que componen la frontera del volumen de control, una fórmula de cuadratura

F I. Mallado utilizado



gaussiana basada en dos nodos de integración mejora los resultados obtenidos con una aproximación integral con un único nodo.

En problemas en los que el número de Courant varía entre 0.5 y 1 una fórmula de cuadratura que utiliza como nodos los cuatro vértices del volumen de control puede evitar los errores de localización en extremos locales y/o falsas oscilaciones que pueden aparecer en el anterior esquema numérico cuando el número de Peclet toma un valor elevado. Aunque en este caso se hace necesaria la utilización de una fórmula de cuadratura que usa el valor de la solución en los dos extremos de cada una de las aristas que constituyen la frontera de los volúmenes de control.

El equivalente de dicho esquema en un dominio unidimensional lo constituye una regla de trapecio simple para la integración en cada volumen de control, que en dicho caso está formado por un intervalo. Un análisis en series de Fourier para el problema con una única ecuación con coeficientes constantes puede probar que el esquema es incondicionalmente estable para valores de θ superiores o iguales a 0.5 y sólo es estable con dichos valores. Los errores de amplificación del esquema son más elevados a medida que θ se aleja de 0.5 razón por la cual puede tomarse $\theta=0.5$ como valor óptimo.

Los errores de fase y amplificación cometidos con dicho esquema son significativos si se elige un número de Courant superior a la unidad. El error de fase es muy pequeño para valores de Courant iguales a la unidad, aunque crece a medida que dicho valor se aleja de 1, especialmente en valores de Courant inferiores a 0.5. Para velocidades convectivas positivas, dicho error de fase es positivo (véase Balaguer [1]) razón por la cual el pico (en general los extremos locales) de la solución numérica se encuentra desplazado a la derecha del de la analítica. Ello provoca la aparición de oscilaciones numéricas en el margen derecho del pico de la curva numérica.

Con velocidades convectivas positivas, el error de amplificación es positivo para valores de $C_r > 0.5$ y negativo cuando $C_r \leq 0.5$. Además dicho error crece a medida que C_r se aleja de 0.5, razón por la cual se considera dicho valor como óptimo. Errores de amplificación positivos pueden introducir oscilaciones numéricas en la dirección contracorriente.

De esta forma en los casos en que existe un importante cambio en la concentración de contaminantes en un número no muy elevado de celdas del mallado, conviene distinguir tres situaciones según el valor del número de Courant del problema:

1) $C_r > 1$. Errores de fase y amplificación inaceptables que conducen a oscilaciones numéricas significativas.

2) $0.5 < C_r \leq 1$. Oscilaciones en la dirección upwind cuando el valor de C_r se acerca a 1 debidas al error de amplificación y oscilaciones en la dirección de la corriente que crecen conforme C_r se acerca a 0.5 debidas al error de fase.

3) $C_r \leq 0.5$. Error de localización en el pico de la curva analítica que conduce a oscilaciones numéricas en la dirección de la corriente convectiva,

las cuales presentan un mayor grado de significación que en el caso 2) y son más importantes cuando C_r se hace más pequeño.

La fórmula del trapecio simple presenta por tanto el mejor comportamiento cuando el número de Courant se encuentra entre 0.5 y 1. Lo mismo ocurre con su homólogo en dos dimensiones que utiliza los cuatro vértices del volumen de control como nodos de integración. Las oscilaciones que presenta el esquema para dichos valores de C_r son poco significativas para Peclet inferiores o cercanos a 10.

En Balaguer et al. [2] se analiza el comportamiento del código basado en el esquema que aquí se propone, para el caso de un problema unidimensional, con una regla del trapecio simple para aproximar las integrales sobre cada una de las celdas. Se comparan las soluciones obtenidas con las que produce el código COLUMN2, (véase Bo et al. [5]) el cual está basado en un esquema que combina el método de características con diferencias finitas. En los ejemplos tipo test que allí se analizan se concluye el grado de precisión semejante que ambos códigos presentan para números de Peclet inferiores a 10. Aunque conviene destacar la mayor sencillez del método de volúmenes finitos, capaz de tratar problemas con velocidad variable y una mayor variedad de condiciones de contorno y sobre todo utiliza un método más fácil de generalizar a la resolución del caso multidimensional en tanto que no utiliza un mallado que se va moviendo a lo largo de las curvas características.

En problemas en los que el número de Courant se encuentra por debajo de 0.5 es preferible el uso de una fórmula de cuadratura gaussiana sobre todo el volumen de control con cuatro nodos de integración, según se puede comprobar en la resolución de algunos problemas tipo test como los que a continuación se presentan.

RESULTADOS DE UN PROBLEMA TIPO TEST

Se resuelve la ecuación:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (v_0 + \lambda y) \frac{\partial u}{\partial x} - D \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = 0$$

$$\forall (x,y) \in \Omega, \forall t \in [0, T]$$

con las siguientes condiciones inicial y frontera:

$$u(x,y,0) = c_0(x,y)$$

$$u(x,y,t) \rightarrow 0 \text{ cuando } |x| \rightarrow \infty \text{ o } |y| \rightarrow \infty, t > 0 \quad (2)$$

siendo v_0 la velocidad en $y=0$, λ la pendiente del perfil de la velocidad convectiva, D una constante positiva, c_0 una función conocida y Ω un rectángulo de $\mathbb{R}^2$ lo suficientemente grande para permitir que se cumpla (2).

Cuando la concentración inicial es una fuente puntual de masa ΔM en $x=x_0$, $y=0$ y $t=0$, la solución analítica viene dada por esta igualdad:

$$u(x,y,t) = \frac{\Delta M}{4\pi D t (1+\lambda^2 t^2/12)^{3/2}} \exp \left(-\frac{(x-\bar{x}-0.5\lambda y t)^2}{4 D t (1+\lambda^2 t^2/12)} - \frac{y^2}{4 D t} \right) \quad (3)$$

$$\text{donde: } \bar{x} = x_0 + v_0 t$$

Para permitir la obtención de las soluciones numéricas, se supone que el cálculo empieza en

$t=t_{ini}$ con una distribución de concentración dada por (3) con:

$$\Delta M = 4\pi D t_{ini} (1+\lambda^2 t_{ini}^2/12)^{3/2}$$

Con ello se consigue una condición inicial que toma un valor igual a 1 en el pico.

Para obtener las soluciones numéricas se usa un mallado formado por rectángulos de lados paralelos a los ejes de coordenadas todos ellos con base y altura igual a $\Delta x = \Delta y = 100$. Para la discretización temporal se considera un paso de tiempo fijo e igual a $\Delta t = 40$. Los siguientes parámetros se usan en la simulación:

$$x_0 = 7200, t_{ini} = 2400, v_0 = 0.5, \lambda = 0.0005, D = 10$$

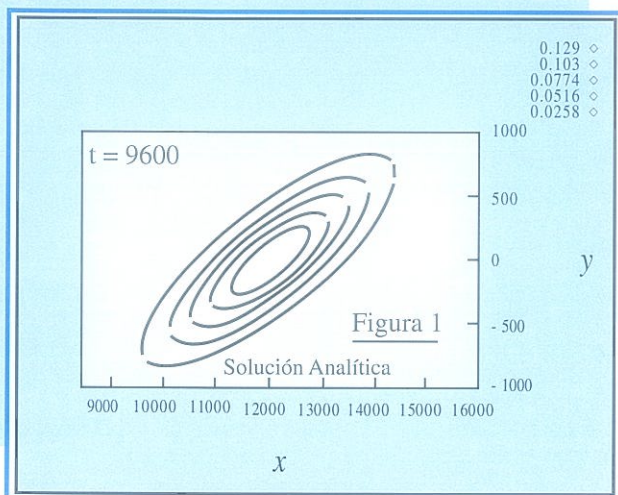
Las figuras 1 a 3 muestran las isolíneas de la solución analítica del problema y la obtenida con los esquemas aquí definidos que usan una fórmula de cuadratura gaussiana con cuatro nodos en la superficie y dos nodos en cada arista de la frontera del volumen (código VOLGAUS) y una cuadratura que usa como nodos los cuatro vértices del volumen de control para integrales sobre su superficie y sobre su frontera (código VOLTRAP). Los resultados se muestran en un tiempo de $t = 9600$.

Se supone que el dominio Ω tiene como valores extremos en la dirección del eje y los puntos con $y=1000$ e $y=-1000$. De esta forma la velocidad a lo largo del eje x varía desde 0 hasta 1 y el número de Courant en x desde 0 hasta 0.4. El número de Peclet en la dirección del eje x pertenece al intervalo $[0,10]$. Dado que el número de Peclet del problema toma valores por debajo de 10 y puesto que el número de Courant siempre es menor que 0.5 el código VOLGAUS puede obtener soluciones precisas. Además el nivel de precisión de dicho código puede ser mayor que el de VOLTRAP, ya que este último requiere que $C_r \in [0.5,1]$ para evitar errores.

La solución analítica tiene forma de campana de GAUSS y está formada por curvas de igual concentración, según muestran las figuras 3 a 5 en forma de isolíneas proyectadas en el plano que forma la base de campana. El valor de la concentración que representan las mismas varía desde 0.129 cerca del pico de la solución hasta 0.0258 para valores alejados del mismo cuando $t=9600$. La curva tiene forma ovalada y está orientada en una dirección diagonal debido a la variación de la velocidad en función de la coordenada y .

Las soluciones obtenidas con VOLTRAP presentan un cierto error que es debido al bajo incremento de tiempo, Δt , elegido, el cual provoca que el número de Courant no supere el valor de 0.5. En cambio VOLGAUS obtiene un buen grado de precisión con valores que sólo difieren en la cuarta cifra decimal con los de la solución analítica. Ambos esquemas mejoran su precisión cuando el valor de tiempo en el que se obtiene la simulación es mayor. Sin embargo VOLGAUS sigue siendo más preciso que VOLTRAP.

A medida que el tiempo de simulación sea mayor, será preciso elegir un dominio Ω más extenso y que por tanto contendrá puntos con valores



de y de mayor magnitud. Ello puede crear números de Courant iguales o superiores a la unidad para el incremento de tiempo que se considera. A partir de estos instantes de tiempo es preferible por tanto el uso del código VOLTRAP para la simulación.

CONCLUSIONES

La precisión del método de volúmenes finitos en esquemas de primer y segundo orden se ve influenciada en gran medida por el tipo de aproximación utilizada para las

integrales sobre la superficie de cada volumen de control y/o sobre su frontera que aparecen en la discretización de las ecuaciones del modelo de transporte de sustancias radiactivas a través de un medio poroso bidimensional y en una zona saturada de la geosfera.

Una fórmula de cuadratura con cuatro nodos de integración mejora el grado de precisión obtenido con un único nodo, manteniendo en ambas una interpolación de grado 1, un esquema convectivo centrado y el método de Crank-Nicholson ($\theta = 0.5$) para la aproximación temporal.

La fórmula de cuadratura gaussiana genera soluciones fiables para números de Courant inferiores o iguales a 0.5. Para valores de Courant superiores a dicha cantidad es preferible el uso de una fórmula de cuadratura que utiliza como nodos los cuatro vértices del volumen de control.

El nivel de precisión

de cada una de las fórmulas de aproximación para las integrales sobre la superficie del volumen de control depende de la técnica de integración utilizada en cada una de sus aristas frontera. De este modo, la fórmula de cuadratura gaussiana sobre todo el volumen de control obtiene su mayor nivel de precisión con una cuadratura gaussiana con dos nodos en cada arista frontera. Para la aproximación que extiende la regla del trapecio simple a dos dimensiones se requiere una técnica que utiliza como nodos los dos extremos de cada segmento de la frontera.

El método de volúmenes finitos, con dichas aproximaciones, permite simular con precisión el proceso de migración de sustancias radiactivas en la geosfera cuando el número de Peclet del problema es inferior a 10. Para alcanzar mayor precisión en problemas con números de Peclet más elevados se precisa utilizar una interpolación espacial de mayor orden que la considerada en el presente trabajo.

AGRADECIMIENTOS

Ángel Balaguer Beser agradece a la Conselleria de Cultura, Educació y Ciencia de la Generalitat Valenciana la concesión de una beca FPI y a la Sociedad Nuclear Española el premio recibido a la mejor tesina de licenciatura curso 1993-94. Carlos Conde Lázaro agradece a ENRESA el apoyo recibido a través del contrato núm. 0700442, dentro del cual se enmarca su participación en este trabajo. Este trabajo ha sido parcialmente subencionado por Fundació Caixa Castelló.

REFERENCIAS

- [1] Balaguer A. (1993): Resolución numérica del problema unidimensional de transporte en la geosfera de residuos radiactivos mediante un método de volúmenes finitos y mediante un método de Random Walk. Tesis de Licenciatura. Universitat Jaume I, Departament de Matemàtiques, Castellón, España.
- [2] Balaguer A., Conde C., López J.A., Martínez V. (1995): "Implementación de un método C.N. trapezoidal de volúmenes finitos para la simulación numérica del proceso de migración unidimensional de una cadena radiactiva." Métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería, Vol 11, N°1, pp 71-90.
- [3] Balaguer A., Conde C., López J.A., Martínez V. (1996): "A partial upwind finite volume scheme for simulating two-dimensional transport systems." En Advances in Ecosystems Research Vol. II. (Eds. G.E. Lasker and E. Tiezzi.) International Institute for advanced Studies, Windsor, Ontario, Canada, pp 84-88.
- [4] Bear J. (1979): Hydraulics of groundwater. Ed. McGraw-Hill, New York, USA.
- [5] Bo P., Carlsen L., Nielsen O.J. (1985): Column2, a computer program for simulating migration. Riso National Laboratory, DK-4000 Roskilde, Dinamarca.
- [6] Gray W.G., Pinder G.F. (1976): "An analysis of the numerical solution of the transport equation." Water Resources Research, Vol. 12, N° 3, pp. 547-555

