



---

# Un modelo matemático para la contaminación de los ríos

---

Trabajo Fin de Grado  
Grado en Matemáticas

Sheila González Rodríguez

Trabajo dirigido por  
Virginia Muto Foresi

Leioa, 18 de febrero de 2021



# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>v</b>
<b>1. Un modelo de difusión-reacción para la contaminación de los ríos</b>	<b>1</b>
1.1. Modelo de Streeter-Phelps . . . . .	1
1.1.1. Desarrollo del modelo . . . . .	2
1.1.2. Solución analítica . . . . .	5
1.1.3. Simulaciones numéricas . . . . .	7
1.2. Modelo de Streeter-Phelps modificado . . . . .	11
1.3. Modelo de difusión-reacción simplificado . . . . .	13
<b>2. Solución analítica</b>	<b>17</b>
2.1. El método tanh . . . . .	17
2.2. Una transformación simple para el método tanh . . . . .	19
2.3. Solución analítica del sistema de difusión-reacción . . . . .	21
<b>3. Simulaciones numéricas</b>	<b>31</b>
3.1. Simulación numérica para difusión nula . . . . .	31
3.2. Simulación numérica para difusión no nula . . . . .	35
<b>A. Código de Mathematica utilizado en el Capítulo 1</b>	<b>41</b>
A.1. Solución analítica del modelo de Streeter-Phelps . . . . .	41
A.2. Simulaciones numéricas . . . . .	41
<b>B. Ejemplo de aplicación de la transformación simple para el método tanh</b>	<b>45</b>
<b>C. Código de Mathematica utilizado en el Capítulo 3</b>	<b>53</b>
C.1. Simulación numérica para difusión nula . . . . .	53
C.2. Simulación numérica para difusión no nula . . . . .	54
<b>Bibliografía</b>	<b>57</b>



# Introducción

El agua es esencial para la vida. Desde el principio de los tiempos, las civilizaciones humanas han decidido asentarse en los cauces de los ríos debido a las grandes ventajas que eso conllevaba: era una fuente de agua potable, de comida, de recursos para la agricultura y la ganadería, un medio de transporte...

El desarrollo de la humanidad ha implicado un incremento en la necesidad de recursos naturales, pero también en la generación de residuos. Por desgracia, este desarrollo también parece haber ido ligado con una creciente irresponsabilidad por parte de las personas con la naturaleza, ya que hemos terminado por convertir a los ríos en nuestros contenedores. Ya sea en forma de vertidos procedentes del sector industrial, de aguas residuales o incluso de la propia basura generada por la actividad humana, son muchas las sustancias contaminantes que terminan en el cauce de los ríos y que pueden provocar que todos los recursos de los que anteriormente nos proveían queden inutilizados.

Todo esto puede no parece un problema desde nuestra perspectiva, pero lo es en países menos desarrollados donde no tienen recursos suficientes para tratar las aguas contaminadas y hacerlas accesibles para su uso y consumo.

La Organización Mundial de la Salud (OMS) ha hecho múltiples declaraciones a este respecto: *“solo un 41 % de la población mundial consume agua tratada y desinfectada como para ser considerada ‘segura’”, “el agua contaminada puede transmitir enfermedades como la diarrea, el cólera, la disentería, la fiebre tifoidea y la poliomielitis”, “se calcula que la contaminación del agua potable provoca más de 502 000 muertes por diarrea al año”, “el 80 % de las enfermedades infecciosas y parasitarias gastrointestinales y una tercera parte de las defunciones causadas por éstas, se deben al uso y consumo de agua contaminada”,* y un largo etcétera.

Todo esto sorprende todavía más si tenemos en cuenta que en 2010, la Asamblea General de las Naciones Unidas reconoció al abastecimiento de agua potable y al saneamiento como un derecho humano explícito.

Llegados a este punto nos encontramos con un problema que parece más acorde a campos como la biología, la química o incluso la física y nos preguntamos, ¿qué podríamos aportar nosotros desde un punto de vista matemático a la solución de este problema? La respuesta es sencilla, podemos aportar información.

Es imposible solucionar algo que no sabes cómo funciona, y ahí entran las matemáticas. Para abordar este tipo de problemas el primer paso es estudiarlos y tratar de modelizarlos con intención, no solo buscar una solución, sino también de predecir cómo van a evolucionar.

A la hora de plantearnos modelizar un proceso cambiante que evoluciona con el tiempo, las ecuaciones diferenciales son las protagonistas. Cuando tratamos problemas reales, en general, intervienen más de una variable independiente (tiempo, espacio,...) y estos siempre se trabajan a través de ecuaciones en derivadas parciales.

En particular, en este documento vamos a plantear, desarrollar y tratar de resolver un modelo matemático basado en ecuaciones en derivadas parciales para la modelización de la contaminación de los ríos.

En el Capítulo 1 plantearemos el modelo de Streeter-Phelps (1925) y estudiaremos sus soluciones para, posteriormente, utilizarlo como base en el desarrollo de un modelo de difusión-reacción más especializado que nos permita modelizar la calidad del agua a través de la concentración de oxígeno disuelto en el río y la demanda bioquímica de oxígeno de las sustancias contaminantes.

Teniendo ya un modelo desarrollado, en el Capítulo 2 trataremos de buscar una solución analítica para ese sistema de ecuaciones en derivadas parciales a través del método de la tangente hiperbólica y una transformación simple procedente de la ecuación de Sine-Gordon.

Por último, en el Capítulo 3 plantearemos el desarrollo de soluciones numéricas para el modelo que tratamos y utilizaremos un programa escrito en *Mathematica* para mostrar simulaciones numéricas en distintas situaciones y con distintos parámetros, con el fin de observar de manera gráfica su evolución.

# Capítulo 1

## Un modelo de difusión-reacción para la contaminación de los ríos

En este capítulo vamos a plantear un modelo basado en ecuaciones en derivadas parciales para modelizar la contaminación de los ríos. En particular, desarrollaremos una modificación del modelo de Streeter-Phelps [1], el cual se aplica a la modelización de la cantidad de oxígeno disuelto (OD) en una corriente de agua tras un vertido de aguas residuales. Así, obtendremos finalmente un modelo funcional para la purificación de los ríos que trataremos de resolver en los capítulos siguientes.

### 1.1. Modelo de Streeter-Phelps

Cuando nos planteamos modelizar la contaminación del agua de los ríos y empezamos a investigar sobre ello nos encontramos con que la base de todos los estudios sobre este tema es el publicado por Harold Warner Streeter y Earle Bernard Phelps en 1925 [1] en el cual plantean el conocido como modelo de Streeter-Phelps. Vamos a dedicar esta sección a replicar y detallar su estudio con el fin de utilizarlo como base sobre la cual desarrollar el modelo de difusión-reacción que estudiaremos en este trabajo.

En dicho estudio plantearon la evolución de la contaminación en el río Ohio basándose en datos obtenidos de manera empírica, pero también desarrollando un gran marco teórico sobre el oxígeno disuelto y su evolución a través de los procesos químicos de oxigenación y aireación.

### 1.1.1. Desarrollo del modelo

Streeter y Phelps plantean un estudio basado en el oxígeno ya que, ante el vertido de aguas residuales o la introducción de cualquier tipo de sustancia contaminante, una corriente de agua siempre reacciona oxidando dichas sustancias hasta su degradación.

La cantidad de oxígeno necesaria para degradar una sustancia contaminante por oxidación se denomina demanda bioquímica de oxígeno (DBO). Debido a este proceso, los niveles de oxígeno disuelto (OD) en la corriente disminuyen. Así la capacidad de auto-purificarse de un río dependerá de los recursos de oxígeno de los que disponga. En particular, consideraremos como fuente de oxígeno el flujo del mismo a través de la atmósfera, más conocido como aireación.

#### **Demanda de oxígeno en una corriente**

La cantidad de oxígeno disuelto en un río se ve afectada por los cambios bioquímicos en el mismo, principalmente por el proceso de oxidación. Ante la presencia de oxígeno, ciertas bacterias oxidarán progresivamente cualquier materia orgánica que haya sido descargada sobre la corriente.

Streeter y Phelps [1] modelizan este proceso bioquímico como una reacción molecular de acuerdo a la siguiente ley:

*”La tasa de oxidación bioquímica de materia orgánica es proporcional a la concentración restante de sustancia no oxidada, medida en términos de oxidabilidad.”*

De acuerdo a ella, podemos plantear la ecuación diferencial ordinaria:

$$-\frac{dL}{dt} = KL, \quad (1.1)$$

donde  $L$  denota la demanda de oxígeno de cierta sustancia en términos de oxígeno,  $t$  es el tiempo y  $K$  una constante representando la tasa a la cual se produce la reacción de oxidación.

Además, también podemos enfocar el mismo proceso desde el lado opuesto. El proceso de oxidación produce una demanda de oxígeno que se cubre mediante las reservas de oxígeno disuelto en el río. Así podemos considerar como  $D_1$  al déficit de saturación de oxígeno, es decir, el descenso en la cantidad de oxígeno disuelto y tenemos que la ecuación:



$$-\frac{dL}{dt} = \frac{dD_1}{dt} = KL \quad (1.2)$$

modeliza también la tasa a la cual el oxígeno del río se va agotando a causa de este proceso.

### Recursos de oxígeno de una corriente

Streeter y Phelps [1] explican que el agua no contaminada siempre tiende a acumular la máxima cantidad de oxígeno disuelto que sea posible según las circunstancias en las que se encuentre (temperatura, presión atmosférica...). A este valor máximo de oxígeno disuelto se le denomina nivel de saturación.

La fuente de este oxígeno será la atmósfera, que lo proveerá a través de la superficie del río y gracias al proceso de aireación. Por este motivo, es lógico pensar que la concentración de oxígeno disuelto en el agua no puede ser mayor que la concentración de oxígeno de la atmósfera porque, si así lo fuera, el proceso de aireación se daría a la inversa y sería el río el que cediera oxígeno en favor de la propia atmósfera. Esto nos indica que la concentración de oxígeno disuelto en un río está limitada por la concentración de oxígeno del aire situado sobre él, es decir, esta concentración será el nivel de saturación del río.

Esto nos permite escribir el déficit de saturación de oxígeno  $D$  en función de la concentración de oxígeno disuelto  $C$  y el nivel de saturación del río  $C_s$ , de modo que tenemos:

$$D = C_s - C \quad (1.3)$$

Así sabemos que cuando el oxígeno disuelto alcanza el valor de saturación el proceso de aireación se detiene, ya que el déficit de saturación de oxígeno se hace nulo.

### Equilibrio de oxígeno en una corriente

Streeter y Phelps [1] aseguran que las reacciones opuestas ya comentadas de desoxigenación y reaeración que se producen en un río contaminado siempre tienden a alcanzar un equilibrio temporal.

En caso de un agua casi saturada de oxígeno en la que introducimos de manera puntual una gran cantidad de sustancias contaminantes, la tasa a la cual el oxígeno se consume es muy elevada frente a la tasa de recuperación del mismo, dando lugar así a que el nivel de oxígeno disuelto en el río disminuya. A medida que este valor disminuye, la tasa de reoxigenación se

va recuperando hasta el punto en el que las tasas de oxígeno gastado y recuperado son iguales, lo cual genera un equilibrio puntual en el cual el nivel de oxígeno disuelto no varía. Este equilibrio es transitorio ya que a medida que la materia orgánica se ha ido oxidando, la demanda de oxígeno ha ido disminuyendo. Esto produce que la tasa a la cual el oxígeno se agota haya disminuido permitiendo así una recuperación gradual del nivel de oxígeno disuelto en el río hasta que este alcanza de nuevo su nivel de saturación.

Si consideramos por otra parte que la contaminación del río es continuada y constante, llegaría un punto en el cual las tasas de reoxigenación y desoxigenación serían iguales, con lo cual el nivel de oxígeno disuelto se mantendría constante en el tiempo generando así un punto de equilibrio.

Es por esto que la tasa de reoxigenación del río será determinante a la hora de estudiar su nivel de contaminación. Conociéndola, podríamos determinar el estado del oxígeno disuelto dado un grado concreto de contaminación o, por el contrario, podríamos conocer el nivel máximo de contaminación que soportaría un cierto río para cualquier tasa de desoxigenación de las sustancias contaminantes correspondientes.

Con todo esto tenemos que, si queremos estudiar la variación del déficit de oxígeno en un río, este proceso vendrá determinado por dos reacciones independientes. Por una parte, el déficit de oxígeno aumenta proporcionalmente a la cantidad de oxígeno necesaria para oxidar la materia orgánica que corresponda, lo cual denotaremos por  $D_1$ . Por otra parte este déficit disminuirá debido a la reaireación,  $D_2$ , a una tasa directamente proporcional a su propio valor, es decir, cuanto mayor sea el déficit de oxígeno mayor será la velocidad a la cual el oxígeno entra al río por reaireación, y viceversa. Estos dos procesos se pueden escribir en forma diferencial:

$$-\frac{dL}{dt} = \frac{dD_1}{dt} = K_1L, \quad (1.4)$$

$$\frac{dD_2}{dt} = -K_2D, \quad (1.5)$$

donde  $t$  es el tiempo,  $L$  la demanda de oxígeno y  $D = D_1 + D_2$  el déficit de saturación de oxígeno, el cual depende de la concentración de oxígeno necesaria para oxidar la materia orgánica por oxidación  $D_1$  y de la concentración de oxígeno que entra al río a través de la superficie  $D_2$ . Además,  $\frac{dD_1}{dt}$  y  $\frac{dD_2}{dt}$  representan las tasas de desoxigenación y de reaireación del río en términos del déficit de saturación de oxígeno y  $K_1$  y  $K_2$  son los coeficientes correspondientes a las tasas de desoxigenación y reaireación respectivamente.

En consecuencia de esto, podemos expresar la tasa neta de cambio en el déficit de oxígeno como la suma algebraica de las dos tasas parciales que ya hemos definido, de forma que obtenemos la siguiente ecuación diferencial lineal de orden uno:

$$\frac{dD}{dt} = \frac{dD_1}{dt} + \frac{dD_2}{dt}, \quad (1.6)$$

$$\frac{dD}{dt} = K_1L - K_2D. \quad (1.7)$$

Con todo este estudio, Streeter y Phelps [1] concluyen el desarrollo teórico principal del modelo que lleva su nombre, véase:

$$\frac{dL}{dt} = -K_1L, \quad (1.8)$$

$$\frac{dD}{dt} = K_1L - K_2D. \quad (1.9)$$

### 1.1.2. Solución analítica

Gracias a la simplicidad de este sistema podemos resolverlo fácilmente de forma analítica mediante integración directa.

En primer lugar vamos a fijar las condiciones iniciales del sistema (1.8) y (1.9) como:

$$L(0) = L_0, \quad D(0) = D_0. \quad (1.10)$$

Integrando la primera ecuación (1.8):

$$\frac{dL}{dt} = -K_1L \Rightarrow \int \frac{dL}{L} = - \int K_1 dt \Rightarrow \quad (1.11)$$

$$\Rightarrow \log L(t) = -K_1t + C \Rightarrow L(t) = Ce^{-K_1t}. \quad (1.12)$$

Para determinar la constante de integración aplicamos la condición inicial  $L(0) = L_0$ :

$$L(0) = Ce^0 \Rightarrow C = L_0, \quad (1.13)$$

obteniendo así la solución:

$$L(t) = L_0e^{-K_1t}. \quad (1.14)$$

Para integrar la segunda ecuación (1.9) empezamos por sustituir la recién calculada  $L$  en el primer término, obteniendo:

$$\frac{dD}{dt} = K_1 L_0 e^{-K_1 t} - K_2 D. \quad (1.15)$$

Nos damos cuenta de que esta EDO es una ecuación diferencial lineal de primer orden (de la forma  $\frac{dy}{dx} + Py = Q$ ), para integrar esto utilizaremos un factor integrante, en particular:

$$e^{\int K_2 dt} = e^{K_2 t}. \quad (1.16)$$

Gracias a esto tenemos:

$$\frac{dD}{dt} e^{K_2 t} + K_2 D e^{K_2 t} = K_1 L_0 e^{-K_1 t} e^{K_2 t} \quad (1.17)$$

$$\frac{d}{dt} \left( D e^{K_2 t} \right) = K_1 L_0 e^{(K_2 - K_1)t}. \quad (1.18)$$

Ahora, integrando directamente:

$$\int d(D e^{K_2 t}) = \int K_1 L_0 e^{(K_2 - K_1)t} dt \quad (1.19)$$

$$D e^{K_2 t} = \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} e^{(K_2 - K_1)t} + C, \quad \text{si } K_1 \neq K_2. \quad (1.20)$$

De nuevo, aplicamos la condición inicial correspondiente  $D(0) = D_0$  para obtener el valor de la constante de integración:

$$D(0)e^0 = \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} e^0 + C \Rightarrow C = D_0 - \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1}. \quad (1.21)$$

Sustituyendo en (1.20):

$$D e^{K_2 t} = \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} e^{(K_2 - K_1)t} + D_0 - \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1}. \quad (1.22)$$

De donde finalmente podemos despejar  $D(t)$  como:

$$D(t) = \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} e^{(K_2 - K_1)t} e^{-K_2 t} + D_0 e^{-K_2 t} - \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} e^{-K_2 t} \quad (1.23)$$

$$\Rightarrow D(t) = \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} e^{-K_1 t} + D_0 e^{-K_2 t} - \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} e^{-K_2 t} \quad (1.24)$$

$$\Rightarrow D(t) = \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} (e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}) + D_0 e^{-K_2 t}, \quad \text{si } K_1 \neq K_2. \quad (1.25)$$

Cabe notar que en para el caso  $K_1 = K_2 = K$ , tendríamos:

$$\frac{dD}{dt} = K L_0 e^{-Kt} - K D. \quad (1.26)$$

Aplicando del mismo modo el factor integrante  $e^{\int K dt} = e^{Kt}$ :

$$\frac{dD}{dt}e^{Kt} + DK e^{Kt} = L_0 K e^{-Kt} e^{Kt} \quad (1.27)$$

$$\frac{d}{dt} \left( D e^{Kt} \right) = L_0 K. \quad (1.28)$$

De donde, integrando directamente, obtenemos lo siguiente:

$$\int d(D e^{Kt}) = \int L_0 K dt \Rightarrow D e^{Kt} = L_0 K t + C. \quad (1.29)$$

Para determinar la constante de integración una vez más aplicamos la condición inicial correspondiente:

$$D(0)e^0 = 0 + C \Rightarrow C = D_0. \quad (1.30)$$

Con lo cual:

$$D(t) = (L_0 K t + D_0) e^{-Kt}, \text{ si } K_1 = K_2 = K. \quad (1.31)$$

### 1.1.3. Simulaciones numéricas

Gracias a las soluciones analíticas obtenidas ((1.14) para  $L(t)$  y (1.25), (1.31) para  $D(t)$ ), podemos realizar representaciones gráficas y observar cómo se comportarán estas soluciones en determinadas circunstancias. Además, podemos comparar estos resultados analíticos con simulaciones numéricas del mismo sistema para estudiar sus similitudes. En este caso utilizaremos *Wolfram Mathematica* y todo el código empleado se encuentra en el Apéndice A.

Recordando (1.3) sabemos que dado un nivel de saturación  $C_s$  tenemos  $D = C_s - C$ . Por eso, para estas representaciones vamos a considerar la variable  $C$  referente al oxígeno disuelto en el agua en lugar de  $D$ , la cual indica el déficit de saturación de oxígeno. Teniendo una de las dos variables la otra queda completamente determinada, pero realizamos este cambio con la intención de facilitar la interpretación de las gráficas.

Para estas representaciones vamos a fijar las tasas de desoxigenación y reaeración en  $K_1 = 0,3$  y  $K_2 = 0,06$ .

También vamos a fijar el nivel de saturación en  $C_s = 9$  y consideraremos el río moderadamente contaminado con una demanda inicial de oxígeno  $L_0 = 4,5$ . A partir de aquí jugaremos con los valores iniciales del déficit de saturación de oxígeno,  $D_0$ , planteando distintas situaciones.

- Reservas de oxígeno disuelto al máximo. Fijamos inicialmente el oxígeno disuelto al nivel de saturación:  $C_0 = C_s = 9 \Rightarrow D_0 = 0$ .

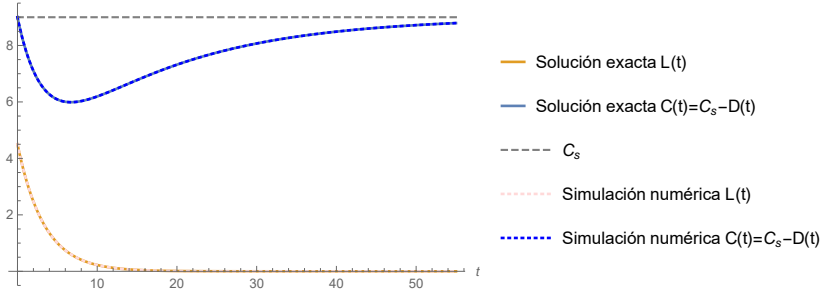


Figura 1.1: Demanda de oxígeno ( $L$ ) y oxígeno disuelto ( $C$ ) con los parámetros  $K_1 = 0,3$ ,  $K_2 = 0,06$ ,  $C_s = 9$ ,  $L_0 = 4,5$ ,  $D_0 = 0$ .

En esta gráfica vemos como el oxígeno disuelto  $C$  comienza en su nivel de saturación y se va reduciendo debido a la demanda de oxígeno  $L$ . Es interesante ver como, tal y como comentábamos previamente, cuando la demanda de oxígeno se equilibra con la aireación el nivel de oxígeno disuelto para de bajar. A partir de ahí, debido a que ya se ha producido degradación de materia orgánica, la demanda de oxígeno se reduce y pasa a ser menor que la entrada de oxígeno por aireación. Esto produce que el oxígeno disuelto aumente y tienda a alcanzar de nuevo su nivel de saturación a la vez que la demanda de oxígeno tiende a desaparecer.

En este caso, además, podemos observar como la solución exacta y la simulación numérica no presentan diferencias significativas hasta el punto de parecer exactamente iguales.

- Algunas reservas de oxígeno disuelto. Fijamos el oxígeno disuelto inicial a la mitad del nivel de saturación:  $C_0 = \frac{C_s}{2} = 4,5 \Rightarrow D_0 = 4,5$ .

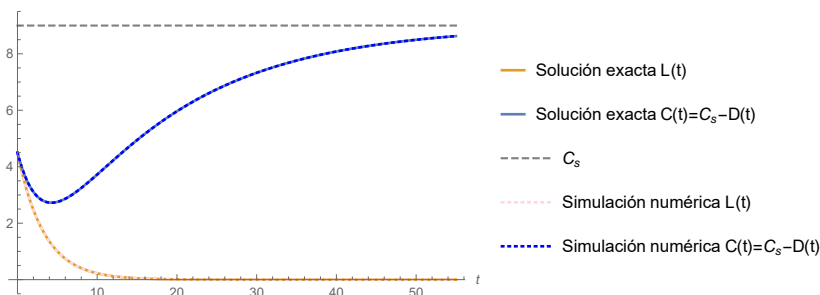


Figura 1.2: Demanda de oxígeno ( $L$ ) y oxígeno disuelto ( $C$ ) con los parámetros  $K_1 = 0,3$ ,  $K_2 = 0,06$ ,  $C_s = 9$ ,  $L_0 = 4,5$ ,  $D_0 = 4,5$ .

Ahora, las reservas iniciales de oxígeno disuelto se encuentran a mitad de su capacidad máxima por lo que al río le costará más trabajo alcanzar este nivel de saturación. A pesar de no tener al máximo las reservas de oxígeno disuelto, seguimos observando la característica forma de campana invertida en la gráfica referente al oxígeno, lo cual nos indica que el proceso por el que pasa el río hasta su purificación es muy similar al del caso anterior.

En cuanto a la comparativa entre la solución exacta y la simulación numérica, al igual que en el caso anterior, ambas gráficas son exactamente iguales.

- Sin reservas de oxígeno disuelto. Fijamos que inicialmente no existen reservas de oxígeno disuelto:  $C_0 = 0 \Rightarrow D_0 = 9$ .

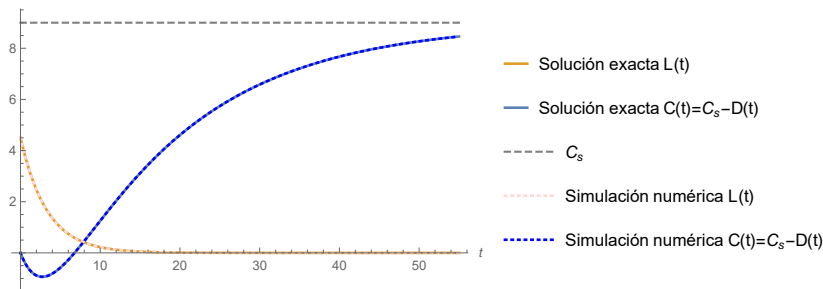


Figura 1.3: Demanda de oxígeno ( $L$ ) y oxígeno disuelto ( $C$ ) con los parámetros  $K_1 = 0,3$ ,  $K_2 = 0,06$ ,  $C_s = 9$ ,  $L_0 = 4,5$ ,  $D_0 = 9$ .

En este caso, ya que no hay reservas iniciales de oxígeno disuelto, cabría esperar que todo el oxígeno que entrara en el río por aireación sería utilizado para degradar materia orgánica y disminuir esta demanda. De ese modo la demanda de oxígeno debería bajar proporcionalmente a la reaireación y, una vez que fuera suficientemente pequeña, el nivel de oxígeno disuelto podría empezar a subir. En la gráfica podemos ver que ocurre algo similar, sin embargo en los primeros instantes el oxígeno disuelto disminuye haciéndose negativo y dando lugar a una solución que no es factible.

Una vez más, la solución exacta y la simulación numérica parecen ser exactamente iguales. Vistos estos ejemplos, podemos asegurar que la aproximación numérica para la solución del modelo de Streeter-Phelps es lo bastante precisa como para ser indistinguible de la solución analítica.

Vamos a observar también cómo evolucionan las soluciones a medida que varía la demanda de oxígeno inicial  $L_0$  con el resto de datos fijados a  $K_1 = 0,3$ ,  $K_2 = 0,06$ ,  $C_s = 9$ ,  $D_0 = 6$ .

- Demanda de oxígeno.

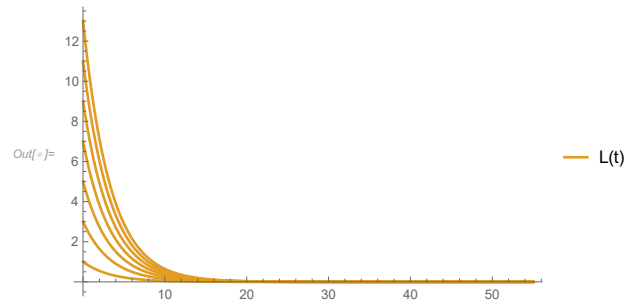


Figura 1.4: Demanda de oxígeno ( $L$ ) para los casos  $L_0 = 1, 3, 5, 7, 9, 11, 13$ .

En esta gráfica podemos observar cómo la demanda de oxígeno siempre disminuye con el mismo patrón. A medida que fijamos como condición inicial una demanda de oxígeno mayor, el tiempo necesario para reducirla aumenta pero podemos observar que no de manera significativa.

- Oxígeno disuelto.

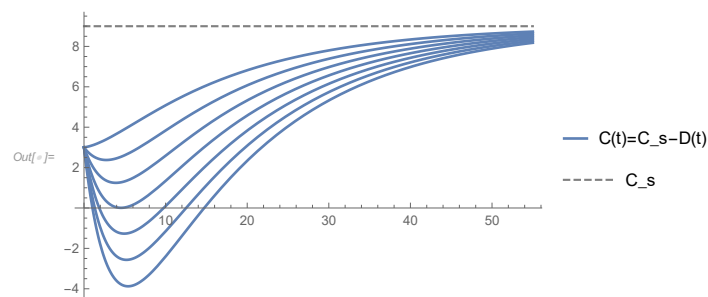


Figura 1.5: Oxígeno disuelto ( $C$ ) para los casos  $L_0 = 1, 3, 5, 7, 9, 11, 13$ .

En este caso observamos la evolución del oxígeno disuelto para distintos niveles de demanda inicial de oxígeno. Podemos observar como la línea superior que hace referencia a  $L_0 = 1$  no desciende en ningún momento sino que desde el principio aumenta. Esto se debe a que la demanda de oxígeno empieza siendo muy pequeña y puede ser suplida simplemente por el proceso de aireación. A medida que aumentamos la demanda inicial de oxígeno vemos como aparece la característica forma de campana invertida que ya hemos visto en las simulaciones



anteriores. Además, de nuevo, nos encontramos con que esta gráfica llega a rebasar el eje horizontal entrando en valores negativos de oxígeno disuelto en varios de los casos.

Como hemos podido observar, estas simulaciones siguen los resultados lógicos que cabría esperar de este modelo hasta cierto punto, pero hay ocasiones en las que las soluciones que obtenemos no son físicamente posibles. Esto se produce debido a cómo se ha planteado el modelo, ya que hay una falta de retroalimentación entre la concentración de oxígeno disuelto y la demanda de oxígeno. Es por este tipo de carencias que se trata de modificar y mejorar el modelo de Streeter-Phelps.

## 1.2. Modelo de Streeter-Phelps modificado

El modelo de Streeter-Phelps que acabamos de desarrollar se basa en el equilibrio temporal entre el oxígeno disuelto en el agua proveniente de la aireación y la demanda de oxígeno necesaria para la oxidación de las sustancias contaminantes, pero no plantea ningún proceso sobre ellas. Con la intención de mejorar este modelo, vamos a desarrollar las ideas del estudio de Streeter y Phelps sobre el marco de las ecuaciones de advección-difusión-reacción (ADR), tal y como plantean Tsegaye Simon y Purnachandra Rao Koya en [2].

Las ecuaciones de advección-difusión-reacción son EDPs con múltiples utilidades. En particular, son ampliamente utilizadas en áreas como la biología, la química o la ingeniería para modelizar la dinámica de multitud de fenómenos naturales con respecto del tiempo.

En este caso, plantearemos un sistema de ecuaciones de ADR para modelizar el transporte de las sustancias contaminantes en el río. Consideraremos  $u_i(x, t)$  las concentraciones de  $n$  sustancias contaminantes diferentes  $i = 1, \dots, n$  vertidas en un cierto río, donde la variable  $x$  representa la distancia a lo largo del río y la variable  $t$  representa el tiempo. Plantearemos así una ecuación tipo de ADR para modelizar la evolución de la concentración de cada una de dichas sustancias:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial(wu_i)}{\partial x} - D_i \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} = \frac{q_i}{A} + k_i u_i + C_i, \quad \forall i = 1, \dots, n. \quad (1.32)$$

En ella podemos distinguir los tres principales procesos:

- $\frac{\partial(wu_i)}{\partial x}$  representa la **advección**, lo cual hace referencia al movimiento de la sustancia debido al flujo del medio en el que se encuentra.

- $D_i \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2}$  representa la **difusión**, que cuantifica el movimiento propio de la sustancia desde las zonas de mayor concentración hacia las de menor concentración.
- $\frac{q_i}{A} + k_i u_i + C_i$  representa la **reacción**, es decir, el proceso químico por el cual las sustancias contaminantes se transforman en otras sustancias químicas.

Además, supondremos  $A$  el área de la sección transversal de río,  $q_i$  la tasa neta de adición de oxígeno de la atmósfera,  $w$  la velocidad a la que fluye el agua del río,  $D_i$  el coeficiente de difusión de la sustancia  $i$ ,  $k_i$  la tasa de emisión de la sustancia  $i$  y  $C_i$  el coeficiente de reacción química del contaminante  $i$  con el resto de sustancias, siendo todos estos coeficientes constantes.

Dado que el término  $C_i$  hace referencia a la reacción entre el contaminante  $i$  y las  $n-1$  sustancias restantes, la ecuación que modeliza la concentración de dicho contaminante  $i$  dependerá también de  $u_1, u_2, \dots, u_{i-1}, u_{i+1}, \dots, u_n$ . Esto implica que las  $n$  ecuaciones propuestas en (1.32) están todas ligadas entre sí, lo cual complica mucho su estudio tanto teórica como computacionalmente.

Para evitar en la medida de lo posible esta complicación, vamos a reducir el número de contaminantes y consideraremos únicamente  $u_1, \dots, u_k$  las concentraciones de los  $k$  contaminantes más representativos. A pesar de que el resto de sustancias contaminantes sean menos significativas individualmente, en conjunto pueden ser muy representativas. Por este motivo, consideraremos  $u_{k+1}$  la concentración de los  $n-k$  contaminantes restantes combinados como si fueran uno solo.

Para simplificar al máximo nuestro modelo y aplicar las ideas y razonamientos del modelo de Streeter-Phelps, tomaremos  $n=2$ , esto es  $k=1$ , y tendremos en cuenta varias consideraciones.

En primer lugar vamos a trabajar con la variable  $u_1$  representando la concentración de oxígeno disuelto (OD) en el agua, ya que es la magnitud más representativa a la hora de modelizar la contaminación de un río. Esto es debido a que cualquier sustancia contaminante que se introduzca en el agua reaccionará con el oxígeno disuelto causando una desoxigenación en el río. Este descenso del oxígeno disuelto es contrarrestado por el proceso de reaireación, que consiste en la transmisión de oxígeno entre la atmósfera y el río gracias a que la superficie aire-agua funciona como una membrana permeable al oxígeno.

En segundo lugar, consideraremos  $u_2$  como la demanda bioquímica de

oxígeno (DBO). Como hemos dicho, cualquier sustancia contaminante introducida en el agua reaccionará con el oxígeno disuelto y el efecto de este proceso sobre el contaminante será una oxidación del mismo que producirá su degradación. Así, esta segunda variable hace referencia a la cantidad de oxígeno por unidad de volumen que necesitarán las sustancias contaminantes introducidas en el agua para su degradación completa por oxidación.

Además, consideraremos que se ha producido un vertido de sustancias contaminantes de manera puntual, es decir, localizado en un punto y que ya ha cesado su emisión.

Por otra parte, dado que el oxígeno disuelto solo se destruye a causa de reacciones químicas tendremos que  $C_1 = 0$ . También, la demanda bioquímica de oxígeno solo descenderá cuando la cantidad de sustancias contaminantes se reduzca y esto se dará por la combinación con el propio oxígeno o por el flujo del agua río abajo, es decir, debido a los efectos de la difusión y la advección. Esto hace que tengamos también  $q_2 = C_2 = 0$ .

Finalmente, consideraremos la velocidad del río  $w$  constante y suficientemente pequeña para poder observar la difusión de las sustancias.

Con todas estas consideraciones obtenemos el siguiente modelo de advección-difusión-reacción para la purificación de los ríos:

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + w \frac{\partial u_1}{\partial x} - D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} = \frac{q_1}{A} - K_1 u_1 \quad (1.33)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + w \frac{\partial u_2}{\partial x} - D_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} = -K_2 u_2. \quad (1.34)$$

### 1.3. Modelo de difusión-reacción simplificado

Aún habiendo obtenido el último modelo (1.33) y (1.34) más especializado, este no será el que utilizemos finalmente en nuestro estudio. El principal motivo es la complejidad teórica de las ecuaciones de ADR, en particular de los términos advectivos, a la hora de encontrar soluciones analíticas. Por este motivo, vamos a desarrollar y simplificar este modelo hasta conseguir que sea funcional para el desarrollo de este trabajo.

En particular, hemos decidido desarrollar este trabajo desde un enfoque Lagrangiano, es decir, estudiando el movimiento de las partículas dentro del flujo de agua pero sin tener en cuenta el movimiento del propio medio.

En consecuencia, nos centraremos en un sistema de ecuaciones de difusión-reacción (DR), el cual será el mismo que plantean Tsegaye Simon y Purnachandra Rao Koya en [3] y [4].

Las ecuaciones de DR están presentes frecuentemente en estudios ambientales, ya que modelizan procesos químicos y dinámicos a través de la reacción y la difusión de sustancias distribuidas en el espacio. Este tipo de ecuaciones pueden presentar soluciones de tipo onda viajera, tal y como estudiaremos más adelante.

Por estos motivos, tomaremos  $w = 0$  y con ello los términos advectivos desaparecerán quedando presentes únicamente los términos difusivos y reactivos, con lo cual, obtenemos el siguiente modelo de difusión-reacción:

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + \frac{q_1}{A} - K_1 u_1, \quad (1.35)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} - K_2 u_2, \quad (1.36)$$

con el que trabajaremos a partir de ahora.

En este modelo  $D_1$  y  $D_2$  denotan los coeficientes de difusión del oxígeno disuelto y de la demanda bioquímica de oxígeno respectivamente,  $q_1$  es la tasa a la que el oxígeno entra al río a través de la superficie y  $K_1$  y  $K_2$  son las tasas de reacción, las cuales hacen referencia a la velocidad a la cual se produce la reacción correspondiente.

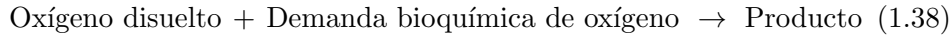
Para desarrollar expresiones adecuadas para estos coeficientes vamos a suponer que la superficie aire-agua del río funciona como una membrana permeable al oxígeno de profundidad efectiva  $h$  y permeabilidad al oxígeno  $k_0$ . También consideraremos que el oxígeno que penetra en el río proviene del aire situado inmediatamente sobre la superficie del agua, el cual tendrá una concentración de oxígeno de  $\omega$ . Así, la tasa de oxígeno que entra al río por aireación a través de la superficie por unidad de área será  $\frac{k_0(\omega - u_1)}{h}$ . Supondremos además la anchura del río constante y la denotaremos como  $b$ , aunque a efectos prácticos este valor puede tomarse como la anchura media del río. Con todo esto tenemos que:

$$\frac{q_1}{A} = \frac{bk_0(\omega - u_1)}{Ah} = \lambda(\omega - u_1), \quad (1.37)$$

donde el parámetro  $\lambda = \frac{bk_0}{Ah}$ , que representa el coeficiente de aireación, es constante. El término  $\omega - u_1$  hace referencia al déficit de oxígeno, esto quiere decir que cuanto mayor sea la diferencia de concentración entre el oxígeno

atmosférico,  $\omega$ , y el oxígeno disuelto en el río,  $u_1$ , más rápido entrará el oxígeno en el río. En caso de que ambos medios tengan la misma concentración este término sería nulo y no habría transporte de oxígeno entre ellos.

Para desarrollar ahora las tasas de reacción  $K_1$  y  $K_2$  vamos a especificar cuál es la reacción química que consume el oxígeno disuelto del río:



Estamos suponiendo que tanto el oxígeno disuelto como la demanda bioquímica de oxígeno se convertirán en el producto a una velocidad proporcional a su concentración en el agua, pero más allá de eso, debido a la definición de la demanda bioquímica de oxígeno, sabemos que ambos decrecen a la misma velocidad, con lo cual:

$$-K_1 u_1 = -K_2 u_2. \quad (1.39)$$

De aquí podemos deducir que ambos términos dependerán tanto de la concentración de oxígeno disuelto como de la demanda bioquímica de oxígeno.

Así tenemos que:

$$-K_1 u_1 = -K_2 u_2 = -\gamma u_1 u_2 \quad (1.40)$$

con  $\gamma$  constante, y en particular:

$$K_1 = \gamma u_2, \quad K_2 = \gamma u_1. \quad (1.41)$$

De este modo podemos reducir los términos referentes a la desoxigenación del río definiendo la función  $K(u_1, u_2)$ .

Entonces, introduciendo los desarrollos (1.37) y (1.40) en el modelo formado por las ecuaciones (1.35) y (1.36), obtenemos el sistema:

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + \lambda(\omega - u_1) - K(u_1, u_2), \quad (1.42)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} - K(u_1, u_2), \quad (1.43)$$

en el cual podemos considerar los términos referentes a la desoxigenación según la velocidad a la que se produzca la reacción, tal y como sigue:

$$K(u_1, u_2) = \begin{cases} K_1 u_1, & \text{cinética de primer orden} \\ K_2 u_1 u_2, & \text{cinética de segundo orden.} \end{cases} \quad (1.44)$$

Realizamos esta distinción ya que, si consideramos un río poco contaminado, la reacción de oxidación de la materia orgánica se producirá de manera mucho más lenta que si la concentración de sustancias contaminantes es mayor. Más concretamente, considerando una reacción lineal de primer orden la cinética a considerar será la de primer orden mientras que si la velocidad de reacción es cuadrática se debe considerar la cinética de segundo orden.

En particular, podemos considerar  $K_2 = \frac{K_1}{\omega}$  de modo que cuando la concentración de oxígeno disuelto está en su nivel de saturación, esto es  $u_1 = \omega$ , aseguramos la coincidencia del factor de desoxigenación debido a ambas cinéticas.

En gran parte de la literatura sobre este tema consideran la cinética de primer orden debido a las ventajas que conlleva la linealización del modelo. En nuestro caso, vamos a considerar que el río que estudiamos está moderadamente contaminado y lo modelizaremos con la cinética de segundo orden.

Así, finalmente, obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones en derivadas parciales ligadas y no lineales con el que trabajaremos para modelizar la purificación del río ante el vertido puntual de sustancias contaminantes:

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + \lambda(\omega - u_1) - \gamma u_1 u_2 \quad (1.45)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} - \gamma u_1 u_2 \quad (1.46)$$

## Capítulo 2

# Solución analítica

En este capítulo trataremos de resolver analíticamente el sistema de ecuaciones de difusión-reacción que hemos planteado en el capítulo anterior utilizando el método propuesto en [5]. Dicho método se basa en el método de la tangente hiperbólica ( $\tanh$ ), el cual se utiliza para encontrar soluciones de ondas viajeras para ecuaciones no lineales de difusión-reacción. Como veremos, gracias a una simple transformación este método se puede extender para resolver un amplio abanico de ecuaciones. En nuestro caso particular vamos a aplicarlo para obtener soluciones de ondas viajeras para un sistemas ligado de ecuaciones no lineales de difusión-reacción.

### 2.1. El método $\tanh$

El método de la tangente hiperbólica se desarrolla con la intención de encontrar soluciones de onda viajera para ecuaciones de evolución no lineales. Trabajar con este método presenta una reducción significativa de la complejidad algebraica, lo cual es una de sus principales ventajas frente a los métodos más tradicionales.

Supongamos que buscamos una solución de onda viajera  $u(x, t)$  para una cierta ecuación de evolución. El primer paso es introducir la variable ondulatoria  $u(x, t) = U(\zeta)$ , con  $\zeta = c(x - \nu t)$ , de modo que la EDP que estábamos resolviendo se transforma en una EDO. En esta nueva variable,  $\nu$  y  $c$  representan la velocidad y la longitud de la onda solución respectivamente. Aplicando la regla de la cadena podemos ver cómo será la transformación de PDE a ODE:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \zeta}{\partial t} \cdot \frac{d}{d\zeta} = -c\nu \frac{d}{d\zeta}, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \zeta}{\partial x} \cdot \frac{d}{d\zeta} = c \frac{d}{d\zeta}. \quad (2.2)$$

El siguiente paso, asumiendo que las soluciones de ondas viajeras se pueden expresar en función de la tangente hiperbólica, será introducir la nueva variable independiente  $y = \tanh(\zeta)$ . Este cambio dará lugar de nuevo a variaciones en las derivadas de acuerdo a la regla de la cadena:

$$\frac{d}{d\zeta} = \frac{dy}{d\zeta} \cdot \frac{d}{dy} = (1 - y^2) \frac{d}{dy}, \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\zeta^2} &= \frac{d}{d\zeta} \left( \frac{d}{d\zeta} \right) = \frac{d}{d\zeta} \left( (1 - y^2) \frac{d}{dy} \right) = \\ &= (1 - y^2) \frac{d}{dy} \left( (1 - y^2) \frac{d}{dy} \right) = \\ &= (1 - y^2) \left( -2y \frac{d}{dy} + (1 - y^2) \frac{d^2}{dy^2} \right). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Con esta nueva variable la solución propuesta resultará del tipo:

$$u(x, t) = U(\zeta) = S(y) = \sum_{n=0}^M b_n y^n, \quad (2.5)$$

siendo  $y = \tanh(\zeta) = \tanh[c(x - \nu t)]$ .

El parámetro  $M$  quedará determinado al sustituir la solución propuesta en la ecuación y compensar los términos de mayor orden. En la mayoría de los casos el resultado es  $M = 2$ .

Por último solo faltaría determinar las condiciones de frontera del problema. Para simplificar a cero las constantes de integración en caso de necesitarlo asumiremos:

$$U(\zeta) \rightarrow 0, \quad \frac{d^n U}{d\zeta^n} \rightarrow 0 \quad (n = 1, 2, \dots) \quad \text{para } \zeta \rightarrow \pm\infty. \quad (2.6)$$

Lo cual, en función de la nueva variable independiente, da lugar a:

$$S(y) \rightarrow 0 \quad \text{para } y \rightarrow \pm 1, \quad (2.7)$$

aunque sin pérdida de generalidad consideraremos el caso  $y \rightarrow 1$ .

Teniendo en cuenta esta última consideración sabemos que las posibles soluciones deben hacerse 0 cuando  $y$  tome el valor  $\pm 1$ , y tomando el caso  $M = 2$  sabemos que serán de segundo grado. Así, nos encontraremos con tres posibles modelos de soluciones propuestas:

(i)  $S_1(y) = b_0(1 - y)(1 + b_1 y) = (1 - y)T(y)$ , con  $b_1 \neq \pm 1$ ,

(ii)  $S_2(y) = b_0(1 - y)^2$ ,



$$(iii) S_3(y) = b_0(1 - y^2).$$

$S_1(y)$  y  $S_3(y)$  serán soluciones de tipo ondas de choque mientras que  $S_2(y)$  será una solución de tipo onda solitaria.

## 2.2. Una transformación simple para el método tanh

Tal y como hemos comentado anteriormente, aplicando una simple transformación podemos modificar el método de la tangente hiperbólica y obtener soluciones analíticas para una amplia variedad de ecuaciones de onda no lineales. Esta transformación da lugar a un método en el cual el álgebra involucrada es si cabe más simple que en el método tanh, y también puede aplicarse, como será nuestro caso, para buscar soluciones de onda viajera en sistemas ligados no lineales de ecuaciones de difusión-reacción.

Vamos a ver que esta simple transformación se puede obtener de la ecuación de Sine-Gordon, tal y como se explica en [6]. Partimos de ella y tenemos:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = m^2 \sin(u), \quad (2.8)$$

con  $m$  constante.

De nuevo introducimos la variable de onda viajera  $\zeta = c(x - \nu t)$ , de modo que  $u(x, t) = U(\zeta)$ , y por la regla de la cadena tendremos que:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial \zeta}{\partial x} \cdot \frac{dU}{d\zeta} = c \frac{dU}{d\zeta}, \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( c \frac{dU}{d\zeta} \right) = c^2 \frac{d^2 U}{d\zeta^2}, \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial \zeta}{\partial t} \cdot \frac{dU}{d\zeta} = -c\nu \frac{dU}{d\zeta}, \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left( -c\nu \frac{dU}{d\zeta} \right) = c^2 \nu^2 \frac{d^2 U}{d\zeta^2}, \quad (2.12)$$

$$(2.13)$$

transformando así la EDP (2.8) en una ODE:

$$\begin{aligned} c^2 \frac{d^2 U}{d\zeta^2} - c^2 \nu^2 \frac{d^2 U}{d\zeta^2} &= m^2 \sin U \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{d^2 U}{d\zeta^2} &= \frac{m^2}{c^2(1 - \nu^2)} \sin(U), \end{aligned} \quad (2.14)$$

con  $c$  y  $\nu$  constantes representando la longitud y la velocidad de onda respectivamente.

Para simplificar la EDO (2.14) vamos a multiplicar a ambos lados de la ecuación por  $\frac{dU}{d\zeta}$ :

$$\frac{d^2U}{d\zeta^2} \cdot \frac{dU}{d\zeta} = \frac{m^2}{c^2(1-\nu^2)} \sin(U) \cdot \frac{dU}{d\zeta}, \quad (2.15)$$

de donde integrando obtenemos:

$$\left( \frac{d}{d\zeta} \left( \frac{1}{2}U \right) \right)^2 = \frac{m^2}{c^2(1-\nu^2)} \sin^2\left(\frac{1}{2}U\right) + C. \quad (2.16)$$

Consideramos la constante de integración  $C = 0$  para simplificar y renombramos:

$$\frac{1}{2}U = \eta, \quad \frac{m^2}{c^2(1-\nu^2)} = a^2, \quad (2.17)$$

de modo que la ecuación (2.16), tomando por conveniencia  $a = 1$ , resulta:

$$\left( \frac{d\eta}{d\zeta} \right)^2 = a^2 \sin^2 \eta \implies \frac{d\eta}{d\zeta} = \sin \eta. \quad (2.18)$$

Esta forma simplificada de la ecuación de Sine-Gordon será la transformación que aplicaremos al método de la tangente hiperbólica para hallar soluciones de onda viajera.

Ahora podemos resolver la ecuación que hemos obtenido de forma simple con el método de separación de variables:

$$\frac{d\eta}{d\zeta} \implies \frac{d\eta}{\sin \eta} = d\zeta \implies \int \frac{d\eta}{\sin \eta} = \int d\zeta \implies \quad (2.19)$$

$$\implies \ln \left| \tan\left(\frac{\eta}{2}\right) \right| = \zeta + C \implies \tan\left(\frac{\eta}{2}\right) = Ke^\zeta \quad (2.20)$$

Pero además, es fácil demostrar que gracias a esta solución podemos hallar relaciones simplificadas entre las expresiones trigonométricas con las que trabajaremos.

$$\sin \eta = 2 \sin \frac{\eta}{2} \cos \frac{\eta}{2} = \frac{2 \sin \frac{\eta}{2} \cos \frac{\eta}{2}}{\sin^2 \frac{\eta}{2} + \cos^2 \frac{\eta}{2}} = \frac{2 \frac{\sin \frac{\eta}{2} \cos \frac{\eta}{2}}{\cos \frac{\eta}{2} \cos \frac{\eta}{2}}}{\frac{\sin^2 \frac{\eta}{2}}{\cos^2 \frac{\eta}{2}} + \frac{\cos^2 \frac{\eta}{2}}{\cos^2 \frac{\eta}{2}}} = \frac{2 \tan \frac{\eta}{2}}{\tan^2 \frac{\eta}{2} + 1} \quad (2.21)$$

$$\cos \eta = \cos^2 \frac{\eta}{2} - \sin^2 \frac{\eta}{2} = \frac{\cos^2 \frac{\eta}{2} - \sin^2 \frac{\eta}{2}}{\sin^2 \frac{\eta}{2} + \cos^2 \frac{\eta}{2}} = \frac{\frac{\cos^2 \frac{\eta}{2}}{\cos^2 \frac{\eta}{2}} - \frac{\sin^2 \frac{\eta}{2}}{\cos^2 \frac{\eta}{2}}}{\frac{\sin^2 \frac{\eta}{2}}{\cos^2 \frac{\eta}{2}} + \frac{\cos^2 \frac{\eta}{2}}{\cos^2 \frac{\eta}{2}}} = \frac{1 - \tan^2 \frac{\eta}{2}}{\tan^2 \frac{\eta}{2} + 1} \quad (2.22)$$

Sustituyendo (2.20) en ambas expresiones y fijando la constante de integración en  $K = 1$  obtenemos que:

$$\sin[\eta(\zeta)] = \frac{2e^\zeta}{1 + e^{2\zeta}} = \frac{2}{e^{-\zeta} + e^\zeta} = \operatorname{sech}(\zeta) \quad (2.23)$$

$$\cos[\eta(\zeta)] = \frac{1 - e^{2\zeta}}{e^{2\zeta} + 1} = \frac{e^{-\zeta} - e^\zeta}{e^\zeta + e^{-\zeta}} = -\tanh(\zeta) \quad (2.24)$$

Estas fórmulas serán las que apliquemos en la práctica a la hora de resolver ecuaciones de onda no lineales y su simplicidad será la causa de que la complejidad algebraica de este nuevo método sea mínima.

Con esto, las nuevas soluciones de onda viajera que propondremos serán del tipo:

$$U(\zeta) = \sum_{j=1}^n \tanh^{j-1}(\zeta) \cdot [B_j \operatorname{sech}(\zeta) + A_j \tanh(\zeta)] + A_0, \quad (2.25)$$

con  $\zeta = c(x - \nu t)$  y habiendo incluido, por simplicidad, los signos negativos correspondientes a los términos de  $\tanh(\zeta)$  en los propios coeficientes indeterminados  $A_i, B_i, i = 1, \dots, n$ .

O lo que es lo mismo, simplificando con (2.23) y (2.24):

$$U(\eta) = \sum_{j=1}^n \cos^{j-1}(\eta) \cdot [B_j \sin(\eta) + A_j \cos(\eta)] + A_0. \quad (2.26)$$

### 2.3. Solución analítica del sistema de difusión-reacción

El primer lugar recordemos el sistema formado por (1.45) y (1.46), el cual queremos resolver:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial t} &= D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + \lambda(\omega - u_1) - \gamma u_1 u_2 \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} &= D_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} - \gamma u_1 u_2. \end{aligned}$$

El primer paso será introducir la variable de onda viajera  $\zeta = c(x - \nu t)$ , con lo que tenemos:

$$u_1(x, t) = U(\zeta), \quad u_2(x, t) = W(\zeta).$$

En consecuencia las derivadas parciales de nuestro sistema, por la regla de la cadena, serán:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \zeta}{\partial t} \cdot \frac{d}{d\zeta} = -c\nu \frac{d}{d\zeta}, \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \zeta}{\partial x} \cdot \frac{d}{d\zeta} = c \frac{d}{d\zeta}, \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( c \frac{d}{d\zeta} \right) = c^2 \frac{d^2}{d\zeta^2}. \quad (2.29)$$

De acuerdo a estos desarrollos obtendremos de (1.45) y (1.46) un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$c\nu \frac{dU}{d\zeta} + D_1 c^2 \frac{d^2 U}{d\zeta^2} + \lambda(\omega - U) - \gamma U W = 0 \quad (2.30)$$

$$c\nu \frac{dW}{d\zeta} + D_2 c^2 \frac{d^2 W}{d\zeta^2} - \gamma U W = 0. \quad (2.31)$$

Ahora, proponemos los siguientes desarrollos en serie como solución al sistema:

$$U(\eta) = \sum_{i=1}^n \cos^{i-1}(\eta) [B_i \sin(\eta) + A_i \cos(\eta)] + A_0, \quad (2.32)$$

$$W(\eta) = \sum_{j=1}^m \cos^{j-1}(\eta) [B'_j \sin(\eta) + A'_j \cos(\eta)] + A'_0, \quad (2.33)$$

donde, gracias a las demostraciones de la sección anterior ((2.23), (2.24) y (2.18)), sabemos que  $\sin(\eta(\zeta)) = \operatorname{sech}(\zeta)$ ,  $\cos(\eta(\zeta)) = -\tanh(\zeta)$  y  $\frac{d\eta}{d\zeta} = \sin \eta$ .

Dado que trabajamos con  $U$ ,  $W$  polinomios trigonométricos, podemos considerar sus grados y obtener:

$$D\left(\frac{dU}{d\zeta}\right) = n + 1, \quad D\left(\frac{d^2 U}{d\zeta^2}\right) = n + 2, \quad (2.34)$$

$$D\left(\frac{dW}{d\zeta}\right) = m + 1, \quad D\left(\frac{d^2 W}{d\zeta^2}\right) = m + 2, \quad (2.35)$$

y dado que  $D(U) = n$ ,  $D(W) = m$  y  $D(UW) = n + m$ , de (2.30) tenemos

que necesariamente  $D\left(\frac{d^2U}{d\zeta^2}\right) = D(UW)$  y análogamente de (2.31) tenemos que  $D\left(\frac{d^2W}{d\zeta^2}\right) = D(UW)$ . Obtenemos así lo siguiente:

$$\begin{aligned}n + 2 &= n + m \Rightarrow m = 2, \\m + 2 &= n + m \Rightarrow n = 2.\end{aligned}$$

Con lo cual llegamos a las siguientes soluciones propuestas:

$$U(\eta) = A_0 + B_1 \sin \eta + A_1 \cos \eta + B_2 \sin \eta \cos \eta + A_2 \cos^2 \eta, \quad (2.36)$$

$$W(\eta) = A'_0 + B'_1 \sin \eta + A'_1 \cos \eta + B'_2 \sin \eta \cos \eta + A'_2 \cos^2 \eta. \quad (2.37)$$

Ahora podemos calcular sus derivadas de forma sencilla:

$$\begin{aligned}\frac{dU}{d\zeta} &= \frac{dU}{d\eta} \cdot \frac{d\eta}{d\zeta} = \left( B_1 \cos \eta - A_1 \sin \eta + B_2 \underbrace{\cos(2\eta)}_{=2 \cos^2 \eta - 1} - A_2 \underbrace{\sin(2\eta)}_{=2 \sin \eta \cos \eta} \right) \cdot \sin \eta = \\&= B_1 \sin \eta \cos \eta - A_1 \underbrace{\sin^2 \eta}_{=1 - \cos^2 \eta} + 2B_2 \cos^2 \eta \sin \eta - B_2 \sin \eta \\&\quad - 2A_2 \underbrace{\sin^2 \eta}_{=1 - \cos^2 \eta} \cos \eta = \\&= B_1 \sin \eta \cos \eta - A_1 + A_1 \cos^2 \eta + 2B_2 \cos^2 \eta \sin \eta - B_2 \sin \eta \\&\quad - 2A_2 \cos \eta + 2A_2 \cos^3 \eta.\end{aligned}$$

De manera completamente análoga:

$$\begin{aligned}\frac{dW}{d\zeta} &= \frac{dW}{d\eta} \cdot \frac{d\eta}{d\zeta} = B'_1 \sin \eta \cos \eta - A'_1 + A'_1 \cos^2 \eta + 2B'_2 \cos^2 \eta \sin \eta \\&\quad - B'_2 \sin \eta - 2A'_2 \cos \eta + 2A'_2 \cos^3 \eta.\end{aligned}$$

Y también:

$$\begin{aligned}\frac{d^2U}{d\zeta^2} &= \frac{d}{d\eta} \left( \frac{dU}{d\zeta} \right) \cdot \frac{d\eta}{d\zeta} = \\&= \frac{d}{d\eta} (B_1 \sin \eta \cos \eta - A_1 + A_1 \cos^2 \eta + 2B_2 \cos^2 \eta \sin \eta - B_2 \sin \eta \\&\quad - 2A_2 \cos \eta + 2A_2 \cos^3 \eta) \cdot \sin \eta =\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left( B_1 \underbrace{\cos(2\eta)}_{2 \cos^2 \eta - 1} - A_1 \underbrace{\sin(2\eta)}_{2 \sin \eta \cos \eta} + 2B_2(\cos^3 \eta - 2 \underbrace{\sin^2 \eta}_{1 - \cos^2 \eta} \cos \eta) - B_2 \cos \eta \right. \\
&\quad \left. + 2A_2 \sin \eta - 6A_2 \cos^2 \eta \sin \eta \right) \cdot \sin \eta = \\
&= 2B_1 \sin \eta \cos^2 \eta - B_1 \sin \eta - 2A_1 \underbrace{\sin^2 \eta}_{1 - \cos^2 \eta} \cos \eta + 2B_2 \sin \eta \cos^3 \eta \\
&\quad - 4B_2 \sin \eta \cos \eta + 4B_2 \sin \eta \cos^3 \eta - B_2 \sin \eta \cos \eta + 2A_2 \underbrace{\sin^2 \eta}_{1 - \cos^2 \eta} \\
&\quad - 6A_2 \cos^2 \eta \underbrace{\sin^2 \eta}_{1 - \cos^2 \eta} = \\
&= 2A_2 - B_1 \sin \eta - 2A_1 \cos \eta - 5B_2 \sin \eta \cos \eta - 8A_2 \cos^2 \eta \\
&\quad 2B_1 \sin \eta \cos^2 \eta + 2A_1 \cos^3 \eta + 6B_2 \sin \eta \cos^3 \eta + 6A_2 \cos^4 \eta.
\end{aligned}$$

Análogamente:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 W}{d\zeta^2} &= \frac{d}{d\eta} \left( \frac{dW}{d\zeta} \right) \cdot \frac{d\eta}{d\zeta} = 2A'_2 - B'_1 \sin \eta - 2A'_1 \cos \eta - 5B'_2 \sin \eta \cos \eta \\
&\quad - 8A'_2 \cos^2 \eta + 2B'_1 \sin \eta \cos^2 \eta + 2A'_1 \cos^3 \eta \\
&\quad + 6B'_2 \sin \eta \cos^3 \eta + 6A'_2 \cos^4 \eta.
\end{aligned}$$

De esta forma para calcular los coeficientes  $A_0, A'_0, A_i, B_i, A'_i, B'_i$  ( $i = 1, 2$ ) vamos a sustituir estas expresiones en las ecuaciones de nuestro sistema. Empezaremos por la primera ecuación (2.30):

$$\begin{aligned}
&cv(B_1 \sin \eta \cos \eta - A_1 + A_1 \cos^2 \eta + 2B_2 \cos^2 \eta \sin \eta - B_2 \sin \eta - 2A_2 \cos \eta \\
&\quad + 2A_2 \cos^3 \eta) \\
&+ D_1 c^2 (2A_2 - B_1 \sin \eta - 2A_1 \cos \eta - 5B_2 \sin \eta \cos \eta - 8A_2 \cos^2 \eta \\
&\quad + 2B_1 \sin \eta \cos^2 \eta + 2A_1 \cos^3 \eta + 6B_2 \sin \eta \cos^3 \eta + 6A_2 \cos^4 \eta) \\
&+ \lambda(\omega - (A_0 + B_1 \sin \eta + A_1 \cos \eta + B_2 \sin \eta \cos \eta + A_2 \cos^2 \eta)) \\
&- \gamma(A_0 + B_1 \sin \eta + A_1 \cos \eta + B_2 \sin \eta \cos \eta + A_2 \cos^2 \eta) \cdot (A'_0 + B'_1 \sin \eta \\
&\quad + A'_1 \cos \eta + B'_2 \sin \eta \cos \eta + A'_2 \cos^2 \eta) = 0
\end{aligned}$$

Agrupando y ordenando términos obtenemos:

$$\begin{aligned}
& c\nu(-A_1 - B_2 \sin \eta - 2A_2 \cos \eta + B_1 \sin \eta \cos \eta + A_1 \cos^2 \eta \\
& \quad + 2B_2 \cos^2 \eta \sin \eta + 2A_2 \cos^3 \eta) \\
& + D_1 c^2 (2A_2 - B_1 \sin \eta - 2A_1 \cos \eta - 5B_2 \sin \eta \cos \eta - 8A_2 \cos^2 \eta \\
& \quad + 2B_1 \sin \eta \cos^2 \eta + 2A_1 \cos^3 \eta + 6B_2 \sin \eta \cos^3 \eta + 6A_2 \cos^4 \eta) \\
& + \lambda(\omega - A_0 - B_1 \sin \eta - A_1 \cos \eta - B_2 \sin \eta \cos \eta - A_2 \cos^2 \eta) \\
& - \gamma([A_0 A'_0 + B_1 B'_1] + [A_0 B'_1 + B_1 A'_0] \sin \eta + [A_0 A'_1 + B_1 B'_2 + A_1 A'_0 \\
& \quad + B_2 B'_1] \cos \eta + [A_0 B'_2 + B_1 A'_1 + A_1 B'_1 + B_2 A'_0] \sin \eta \cos \eta + [A_0 A'_2 \\
& \quad - B_1 B'_1 + A_1 A'_1 + B_2 B'_2 + A_2 A'_0] \cos^2 \eta + [B_1 A'_2 + A_1 B'_2 + B_2 A'_1 \\
& \quad + A_2 B'_1] \sin \eta \cos^2 \eta + [-B_1 B'_2 + A_1 A'_2 - B_2 B'_1 + A_2 A'_1] \cos^3 \eta \\
& \quad + [B_2 A'_2 + A_2 B'_2] \sin \eta \cos^3 \eta + [-B_2 B'_2 A_2 A'_2] \cos^4 \eta) = 0
\end{aligned}$$

Llegados a este punto y gracias a cómo hemos desarrollado las identidades trigonométricas, podemos asegurar que para que esta expresión valga cero los coeficientes de cada término deben ser nulos.

$$\text{constante :} \quad -c\nu A_1 + 2D_1 c^2 A_2 + \lambda(\omega - A_0) - \gamma(A_0 A'_0 + B_1 B'_1) = 0 \quad (2.38)$$

$$\sin \eta : \quad -2c\nu B_2 - D_1 c^2 B_1 - \lambda B_1 - \gamma(A_0 B'_1 + B_1 A'_0) = 0 \quad (2.39)$$

$$\cos \eta : \quad -2c\nu A_2 - 2D_1 c^2 A_1 - \lambda A_1 - \gamma(A_0 A'_1 + B_1 B'_2 + A_1 A'_0 + B_2 B'_1) = 0 \quad (2.40)$$

$$\sin \eta \cos \eta : \quad c\nu B_1 - 5D_1 c^2 B_2 - \lambda B_2 - \gamma(A_0 B'_2 + B_1 A'_1 + A_1 B'_1 + B_2 A'_0) = 0 \quad (2.41)$$

$$\cos^2 \eta : \quad c\nu A_1 - 8D_1 c^2 A_2 - \lambda A_2 - \gamma(A_0 A'_2 - B_1 B'_1 + A_1 A'_1 + B_2 B'_2 + A_2 A'_0) = 0 \quad (2.42)$$

$$\sin \eta \cos^2 \eta : \quad 2c\nu B_2 + 2D_1 c^2 B_1 - \gamma(B_1 A'_2 + A_1 B'_2 + B_2 A'_1 + A_2 B'_1) = 0 \quad (2.43)$$

$$\cos^3 \eta : \quad 2c\nu A_2 + 2D_1 c^2 A_1 - \gamma(-B_1 B'_2 + A_1 A'_2 - B_2 B'_1 + A_2 A'_1) = 0 \quad (2.44)$$

$$\sin \eta \cos^3 \eta : \quad 6D_1 c^2 B_2 - \gamma(B_2 A'_2 + A_2 B'_2) = 0 \quad (2.45)$$

$$\cos^4 \eta : \quad 6D_1 c^2 A_2 - \gamma(-B_2 B'_2 A_2 A'_2) = 0 \quad (2.46)$$

Y análogamente sustituyendo las expresiones correspondientes en la ecuación (2.31) obtendremos lo siguiente:

$$\text{constante :} \quad -c\nu A'_1 + 2D_1c^2 A'_2 - \gamma(A_0A'_0 + B_1B'_1) = 0 \quad (2.47)$$

$$\sin \eta : \quad -2c\nu B'_2 - D_1c^2 B'_1 - \gamma(A_0B'_1 + B_1A'_0) = 0 \quad (2.48)$$

$$\cos \eta : \quad -2c\nu A'_2 - 2D_1c^2 A'_1 - \gamma(A_0A'_1 + B_1B'_2 + A_1A'_0 + B_2B'_1) = 0 \quad (2.49)$$

$$\sin \eta \cos \eta : \quad c\nu B'_1 - 5D_1c^2 B'_2 - \gamma(A_0B'_2 + B_1A'_1 + A_1B'_1 + B_2A'_0) = 0 \quad (2.50)$$

$$\cos^2 \eta : \quad c\nu A'_1 - 8D_1c^2 A'_2 - \gamma(A_0A'_2 - B_1B'_1 + A_1A'_1 + B_2B'_2 + A_2A'_0) = 0 \quad (2.51)$$

$$\sin \eta \cos^2 \eta : \quad 2c\nu B'_2 + 2D_1c^2 B'_1 - \gamma(B_1A'_2 + A_1B'_2 + B_2A'_1 + A_2B'_1) = 0 \quad (2.52)$$

$$\cos^3 \eta : \quad 2c\nu A'_2 + 2D_1c^2 A'_1 - \gamma(-B_1B'_2 + A_1A'_2 - B_2B'_1 + A_2A'_1) = 0 \quad (2.53)$$

$$\sin \eta \cos^3 \eta : \quad 6D_1c^2 B'_2 - \gamma(B_2A'_2 + A_2B'_2) = 0 \quad (2.54)$$

$$\cos^4 \eta : \quad 6D_1c^2 A'_2 - \gamma(-B_2B'_2A_2A'_2) = 0 \quad (2.55)$$

Ahora para calcular el valor de nuestros coeficientes debemos resolver el sistema formado por las ecuaciones (2.38) a (2.46) y (2.47) a (2.55).

$$(2.48) - (2.57) \Rightarrow 6D_1c^2 A_2 - \gamma(-B_2B'_2A_2A'_2) - 6D_1c^2 A'_2 + \gamma(B_2A'_2 + A_2B'_2) = 0$$

$$\underbrace{6D_1c^2}_{\neq 0} (A_2 - A'_2) = 0 \Rightarrow A_2 = A'_2$$

$$(2.47) - (2.56) \Rightarrow 6D_1c^2 B_2 - \gamma(B_2A'_2 + A_2B'_2) - 6D_1c^2 B'_2 + \gamma(B_2A'_2 + A_2B'_2) = 0$$

$$\underbrace{6D_1c^2}_{\neq 0} (B_2 - B'_2) = 0 \Rightarrow B_2 = B'_2$$

$$(2.46) - (2.55) \Rightarrow 2c\nu A_2 + 2D_1c^2 A_1 - \gamma(-B_1B'_2 + A_1A'_2 - B_2B'_1 + A_2A'_1) - 2c\nu A'_2 - 2D_1c^2 A'_1 + \gamma(-B_1B'_2 + A_1A'_2 - B_2B'_1 + A_2A'_1) = 0$$

$$2c\nu \underbrace{(A_2 - A'_2)}_{=0} + \underbrace{2D_1c^2}_{\neq 0} (A_1 - A'_1) = 0 \Rightarrow A_1 = A'_1$$



$$\begin{aligned}
(2.45) - (2.54) &\Rightarrow 2c\nu B_2 + 2D_1c^2B_1 - \gamma(B_1A'_2 + A_1B'_2 + B_2A'_1 + A_2B'_1) \\
&\quad - 2c\nu B'_2 - 2D_1c^2B'_1 + \gamma(B_1A'_2 + A_1B'_2 + B_2A'_1 \\
&\quad + A_2B'_1) = 0 \\
&\Rightarrow 2c\nu \underbrace{(B_2 - B'_2)}_{=0} + \underbrace{2D_1c^2(B_1 - B'_1)}_{\neq 0} = 0 \Rightarrow B_1 = B'_1
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(2.44) - (2.53) &\Rightarrow c\nu A_1 - 8D_1c^2A_2 - \lambda A_2 - \gamma(A_0A'_2 - B_1B'_1 + A_1A'_1 \\
&\quad + B_2B'_2 + A_2A'_0) - c\nu A'_1 + 8D_1c^2A'_2 + \gamma(A_0A'_2 \\
&\quad - B_1B'_1 + A_1A'_1 + B_2B'_2 + A_2A'_0) = 0 \\
&\Rightarrow c\nu \underbrace{(A_1 - A'_1)}_{=0} + 8D_1c^2 \underbrace{(A'_2 - A_2)}_{=0} - \underbrace{\lambda}_{\neq 0} A_2 = 0 \Rightarrow \\
&\Rightarrow A_2 = 0 = A'_2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(2.43) - (2.52) &\Rightarrow c\nu B_1 - 5D_1c^2B_2 - \lambda B_2 - \gamma(A_0B'_2 + B_1A'_1 + A_1B'_1 \\
&\quad + B_2A'_0) - c\nu B'_1 + 5D_1c^2B'_2 + \gamma(A_0B'_2 + B_1A'_1 \\
&\quad + A_1B'_1 + B_2A'_0) = 0 \\
&\Rightarrow c\nu \underbrace{(B_1 - B'_1)}_{=0} + 5D_1c^2 \underbrace{(B'_2 - B_2)}_{=0} - \underbrace{\lambda}_{\neq 0} B_2 = 0 \Rightarrow \\
&\Rightarrow B_2 = 0 = B'_2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(2.42) - (2.51) &\Rightarrow -2c\nu A_2 - 2D_1c^2A_1 - \lambda A_1 - \gamma(A_0A'_1 + B_1B'_2 + A_1A'_0 \\
&\quad + B_2B'_1) + 2c\nu A'_2 + 2D_1c^2A'_1 + \gamma(A_0A'_1 + B_1B'_2 \\
&\quad + A_1A'_0 + B_2B'_1) = 0 \\
&\Rightarrow 2c\nu \underbrace{(A'_2 - A_2)}_{=0} + 2D_1c^2 \underbrace{(A'_1 - A_1)}_{=0} - \underbrace{\lambda}_{\neq 0} A_1 = 0 \Rightarrow \\
&\Rightarrow A_1 = 0 = A'_1
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(2.41) - (2.50) &\Rightarrow -2c\nu B_2 - D_1c^2B_1 - \lambda B_1 - \gamma(A_0B'_1 + B_1A'_0) \\
&\quad 2c\nu B'_2 + D_1c^2B'_1 + \gamma(A_0B'_1 + B_1A'_0) = 0 \\
&\Rightarrow 2c\nu \underbrace{(B'_2 - B_2)}_{=0} + D_1c^2 \underbrace{(B'_1 - B_1)}_{=0} - \underbrace{\lambda}_{\neq 0} B_1 = 0 \Rightarrow \\
&\Rightarrow B_1 = 0 = B'_1
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(2.40) - (2.49) &\Rightarrow -c\nu A_1 + 2D_1c^2A_2 + \lambda(\omega - A_0) - \gamma(A_0A'_0 + B_1B'_1) \\
&\quad + c\nu A'_1 - 2D_1c^2A'_2 + \gamma(A_0A'_0 + B_1B'_1) = 0 \\
&\Rightarrow c\nu \underbrace{(A'_1 - A_1)}_{=0} + 2D_1c^2 \underbrace{(A_2 - A'_2)}_{=0} - \underbrace{\lambda}_{\neq 0} (\omega - A_0) = 0 \Rightarrow \\
&\Rightarrow A_0 = \omega
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(2.40) \Rightarrow & -c\nu \underbrace{A_1}_{=0} + 2D_1c^2 \underbrace{A_2}_{=0} + \lambda(\underbrace{\omega - A_0}_{=0}) - \gamma(A_0A'_0 \\
& + \underbrace{B_1B'_1}_{=0}) = 0 \\
& - \gamma \underbrace{\omega}_{\neq 0} A'_0 = 0 \Rightarrow \gamma A'_0 = 0
\end{aligned}$$

Esta última ecuación nos abre dos posibilidades:

(i)  $A'_0 = 0$ . Con esto las soluciones propuestas quedarían como:

$$U(\eta) = \omega, \quad (2.56)$$

$$W(\eta) = 0, \quad (2.57)$$

de donde concluimos:

$$u_1(t) = \omega, \quad (2.58)$$

$$u_2(t) = 0. \quad (2.59)$$

(ii)  $A'_0 \neq 0 \Rightarrow \gamma = 0$ . En este caso la tasa de reacción  $\gamma$  es nula y las soluciones propuestas resultarían:

$$U(\eta) = \omega, \quad (2.60)$$

$$W(\eta) = A'_0, \quad (2.61)$$

de donde concluimos:

$$u_1(t) = \omega, \quad (2.62)$$

$$u_2(t) = A'_0. \quad (2.63)$$

Tal y como podemos ver, las únicas posibles soluciones que hemos obtenido a través de la transformación del método tanh han resultado ser las triviales.

En el caso (i) obtenemos la solución en la cual la concentración de oxígeno disuelto se mantiene constante en el nivel de saturación del río, mientras que la demanda bioquímica de oxígeno es nula. Así, esta solución representa un río limpio en el que no se introducen sustancias contaminantes.

En el caso (ii) la concentración de oxígeno disuelto también se mantiene en su nivel de saturación, pero la demanda bioquímica de oxígeno resulta constante en un cierto valor fijado  $A'_0$ . Ya que en este caso tenemos que

necesariamente  $\gamma = 0$  sabemos que, por algún motivo externo al modelo, las sustancias que se han introducido al río no van a tener capacidad de reacción. Es por esto por lo que el nivel de oxígeno no disminuye para oxidarlas, y también implica que dichas sustancias no se degradarán y por tanto su DBO también se mantendrá constante a lo largo del tiempo.

Para estudiar por qué este método no ha funcionado al utilizarlo en nuestro sistema recurriremos a la referencia [5] y compararemos el sistema con el que trabajan *A.H. Karter et al.* con el de nuestro estudio. Los cálculos detallados del sistema estudiado de *A.H. Karter et al.* están disponibles en el Apéndice B.

A simple vista podemos destacar que las diferencias se encuentran en los términos reactivos. En primer lugar el sistema (1.45) y (1.46) cuenta con un término lineal en la primera ecuación además del término correspondiente a las cinéticas, que será lineal o cuasilineal según tomemos cinéticas de primer o segundo orden respectivamente. Además, dichos términos tienen igual signo. Por otra parte, el sistema que utilizan en la referencia [5] cuenta con un término lineal y otro no lineal en cada ecuación, además de que dichos términos tienen signos opuestos en cada una de ellas.

Estos cambios provocan diferencias cuando desarrollamos las ecuaciones del sistema con las soluciones propuestas y separamos los coeficientes de cada término trigonométrico. En el caso del estudio de *A.H. Karter et al.* las ecuaciones que obtienen para cada término y correspondientes a las dos ecuaciones del sistema tienen en la parte reactiva los mismos términos pero de signos opuestos. Esto provoca que la forma más fácil de resolver sea sumando dichas ecuaciones para deshacerse de ellos, pero con eso mantiene los términos correspondientes a la difusión y la reacción (la parte que viene de las derivadas).

En nuestro caso, como dichos términos reactivos tienen signos iguales, recurrimos a restar las ecuaciones obtenidas para cada coeficiente trigonométrico simplificando con ello también los términos de difusión y de reacción, que también tienen signos iguales. Esto ha resultado en las soluciones triviales que ya hemos visto para cada coeficiente a excepción de  $A_0$ , el cual ha resultado no nulo gracias al término independiente de la primera ecuación (1.45) correspondiente al término de aireación del río.

Con todo esto, aunque el método desarrollado en [5] estaba planteado para encontrar soluciones de ondas viajeras para sistemas ligados de ecuaciones no lineales de difusión-reacción, hemos podido comprobar que no ha sido eficaz para nuestro sistema en particular.

Por este motivo, no hemos podido encontrar ninguna solución analítica con valor matemático significativo para nuestro modelo de contaminación de los ríos.

Dado que en el Capítulo 1, concretamente en el estudio del modelo de Streeter-Phelps, vimos que las aproximaciones numéricas se comportaban muy bien en relación a las soluciones exactas, nos planteamos si de este modo también podríamos obtener buenos resultados para el sistema que estudiamos. Es por esto que procedemos en el siguiente capítulo al estudio numérico de nuestro modelo.

## Capítulo 3

# Simulaciones numéricas

En este capítulo vamos a proceder con un estudio numérico del modelo de difusión-reacción (1.45) y (1.46) tal y como plantean en [3] y [7]. Para la simulación numérica de nuestros resultados vamos a utilizar *Wolfram Mathematica*. Todos los códigos empleados están a disposición del lector en el Apéndice C.

Dado que no estamos considerando términos advectivos en nuestro sistema, las variaciones a lo largo del río no van a ser significativas. Además, suponemos el río con suficiente turbulencia como para que tampoco sean significativos los cambios hacia el fondo del mismo, es decir, suponemos que el agua se mezcla tanto como para considerar el estado del río uniforme en profundidad. Así, trabajaremos con secciones transversales y la variable espacial  $x$  hará referencia a la anchura del río, de modo que las condiciones de frontera que fijemos corresponderán a las condiciones en las orillas del río.

Con intención de facilitar la interpretación de las simulaciones numéricas, vamos a estudiar por separado los casos de difusión nula y no nula.

### 3.1. Simulación numérica para difusión nula

Empezaremos el estudio numérico considerando el caso más simple en que la difusión dentro del río es nula, esto es  $D_1 = D_2 = 0$ . Con esta consideración, el sistema de ecuaciones en derivadas parciales (1.45) y (1.46) se convierte en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\frac{du_1}{dt} = \lambda(\omega - u_1) - \gamma u_1 u_2 \quad (3.1)$$

$$\frac{du_2}{dt} = -\gamma u_1 u_2 \quad (3.2)$$

En este caso solo estamos considerando el proceso de auto-purificación del río, véase los términos de aireación a través de la superficie y desoxigenación por la oxidación de la materia orgánica, sin tener en cuenta la difusión de las sustancias en el espacio.

Además, este sistema guarda similitud con el modelo inicial de Streeter-Phelps (1.8) y (1.9), con la única diferencia de que nosotros estamos trabajando con la cinética de segundo orden, por lo que las simulaciones no serán exactamente iguales.

Para resolver numéricamente el sistema formado por (3.1) y (3.2) utilizamos un método Runge-Kutta de orden 4, aplicando la opción `Method`  $\rightarrow$  `{ "ExplicitRungeKutta", "DifferenceOrder"  $\rightarrow$  4 }` en el comando `NDSolve` de *Mathematica*. (Ver Apéndice C para más detalles).

Fijaremos los parámetros necesarios como  $\lambda = 3$ ,  $\omega = 1$ ,  $\gamma = 1$ . Además limitaremos el campo de estudio a  $0 \leq t \leq 10$ , ya que es suficiente para observar este proceso.

Consideraremos varias condiciones iniciales para la concentración de oxígeno disuelto, al igual que hicimos en la sección (1.1.3) con el modelo de Streeter-Phelps, con intención de ver cómo evolucionan el OD y la DBO:

- Inicialmente río no contaminado, concentración de oxígeno disuelto en el nivel de saturación  $u_1(0) = \omega = 1$ .

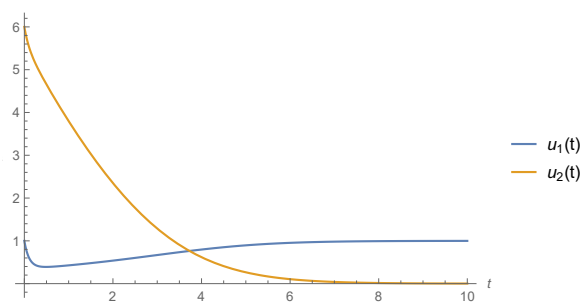


Figura 3.1: Concentración de oxígeno disuelto  $u_1$  y demanda bioquímica de oxígeno  $u_2$  para la condición inicial  $u_1(0) = 1$ .

En este caso, consideramos la situación en la que partimos de un río completamente limpio, lo cual indica que la concentración de oxígeno disuelto será máxima e igual al nivel de saturación del río, e introduciremos ciertas sustancias contaminantes con una demanda bioquímica

de oxígeno 6 veces mayor que dicho nivel.

Al introducir sustancias contaminantes en el río limpio, la concentración de oxígeno disuelto desciende mientras oxida esas sustancias. A su vez, según dichas sustancias se desintegran, la demanda bioquímica de oxígeno debido a ellas disminuye. Llega un momento en el cual la demanda de oxígeno debida al proceso de oxidación se compensa únicamente con el oxígeno que entra en el río por aireación a través de las superficie, lo cual implica que la concentración de oxígeno disuelto para de descender. A partir de ahí, ya que la demanda bioquímica de oxígeno sigue siendo descendiente, el proceso de aireación hace que la concentración de oxígeno disuelto en el río vuelva a aumentar tendiendo siempre a alcanzar su nivel de saturación.

- Inicialmente río parcialmente contaminado, concentración de oxígeno disuelto a mitad del nivel de saturación  $u_1(0) = \frac{\omega}{2} = 0,5$ .

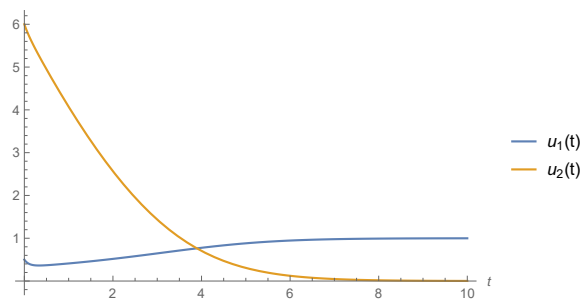


Figura 3.2: Concentración de oxígeno disuelto  $u_1$  y demanda bioquímica de oxígeno  $u_2$  para la condición inicial  $u_1(0) = 0,5$ .

En esta situación podemos observar que la evolución de la concentración de oxígeno disuelto y la demanda bioquímica de oxígeno siguen un patrón análogo al del caso anterior. La única leve diferencia que podemos observar es que la concentración de oxígeno disuelto parece tardar un poco más de tiempo en recuperarse a su nivel de saturación, lo cual tiene sentido teniendo en cuenta que partimos de una concentración inicial de oxígeno disuelto menor.

- Inicialmente río totalmente contaminado, concentración de oxígeno disuelto nula  $u_1(0) = 0$ .

En este caso vemos que en un primer momento, el oxígeno proveniente de la aireación parece emplearse tanto para degradar la materia

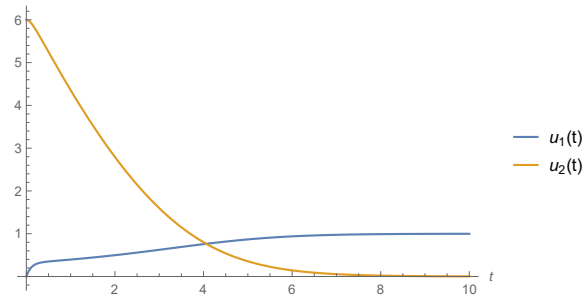


Figura 3.3: Concentración de oxígeno disuelto  $u_1$  y demanda bioquímica de oxígeno  $u_2$  para la condición inicial  $u_1(0) = 0$ .

orgánica, lo cual hace que la demanda bioquímica de oxígeno descienda, como para almacenar una pequeña concentración de oxígeno disuelto en reserva. Cuando el río ya ha llegado a una cierta concentración de oxígeno disuelto, observamos que la velocidad a la que aumenta esta concentración desciende drásticamente, lo cual podemos suponer que es debido a que la mayor cantidad de oxígeno que entra a través de la superficie se invierte en satisfacer la demanda bioquímica de oxígeno de la materia orgánica. Aún así, la concentración de oxígeno sigue subiendo poco a poco debido a que la degradación de las sustancias contaminantes provoca un descenso en la demanda bioquímica de oxígeno. Como siempre, la concentración de oxígeno aumentará hasta llegar al nivel de saturación y la demanda bioquímica de oxígeno descenderá hasta llegar a cero.

Observando el sistema (3.1), (3.2) podemos encontrar similitud con el modelo de Streeter-Phelps estudiado en el Capítulo 1. En particular, la concentración de oxígeno disuelto  $u_1(t)$  en el modelo de Streeter-Phelps era representada por  $C(t) = C_s - D(t)$  (con  $C_s$  el nivel de saturación del río y  $D(t)$  representando el déficit de oxígeno), y la demanda bioquímica de oxígeno  $u_2(t)$  es equivalente a  $L(t)$  en ese modelo.

Podemos apreciar que estos resultados para los dos primeros casos son muy similares a los obtenidos en las simulaciones numéricas del modelo de Streeter-Phelps. En cambio, cuando partimos de un río completamente contaminado el modelo de difusión-reacción muestra un resultado más acorde a la realidad que el de Streeter-Phelps, ya que en este obteníamos una situación físicamente imposible en la que la concentración de oxígeno disuelto tomaba valores negativos.



### 3.2. Simulación numérica para difusión no nula

Ahora vamos a considerar el caso en que la difusión es no nula, es decir,  $D_1 \neq 0$  y  $D_2 \neq 0$  y trabajamos con el sistema de ecuaciones en derivadas parciales (1.45) y (1.46):

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_1}{\partial t} &= D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + \lambda(\omega - u_1) - \gamma u_1 u_2, \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} &= D_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} - \gamma u_1 u_2.\end{aligned}$$

Para resolverlo numéricamente vamos a proceder con el conocido como método de líneas (MOL). Este método se basa en la discretización de todas las variables que intervienen en el sistema excepto una, de modo que se obtenga un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias al que se pueda aplicar algún otro método de resolución numérica. Normalmente las variables espaciales se discretizan mientras que la variable que se mantiene como continua es la temporal.

En nuestro caso particular, vamos a considerar la variable espacial contenida en el intervalo unitario  $0 \leq x \leq 1$  y vamos a discretizarlo en un total de  $N = 20$  subintervalos, de modo que el tamaño del paso resulta  $\Delta x = \frac{1}{20}$ . Así, el  $i$ -ésimo subintervalo lo podemos escribir de la forma  $[0,05(i-1), 0,05i]$ ,  $\forall i \in \{0, 1, \dots, n\}$ .

Ahora, con la variable espacial discretizada, debemos aproximar las derivadas segundas que aparecen en los términos de difusión. Para ello, utilizaremos diferencias centrales de segundo orden:

$$u_{1,xx}|_i = \frac{u_{1,i+1} - 2u_{1,i} + u_{1,i-1}}{\Delta x^2}, \quad (3.3)$$

$$u_{2,xx}|_i = \frac{u_{2,i+1} - 2u_{2,i} + u_{2,i-1}}{\Delta x^2}, \quad (3.4)$$

con  $i = 1, \dots, n-1$ . De ahora en adelante vamos a denotar  $\frac{\partial u_{1,i}}{\partial t} = \dot{u}_{1,i}$  y  $\frac{\partial u_{2,i}}{\partial t} = \dot{u}_{2,i}$ , siendo  $u_{1,i} = u_{1,i}(t)$ ,  $u_{2,i} = u_{2,i}(t)$  dependientes únicamente del tiempo. Así, el sistema formado por las ecuaciones en derivadas parciales (1.45) y (1.46) se convierte en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}\dot{u}_{1,i} &= \left( \frac{D_1}{\Delta x^2} \right) (u_{1,i+1} - 2u_{1,i} + u_{1,i-1}) \\ &\quad + \lambda(\omega - u_{1,i}) - \gamma u_{1,i} u_{2,i},\end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} \dot{u}_{2,i} = & \left( \frac{D_2}{\Delta x^2} \right) (u_{2,i+1} - 2u_{2,i} + u_{2,i-1}) \\ & - \gamma u_{1,i} u_{2,i}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

$\forall i = 1, 2, \dots, n-1$ .

Además, podemos escribir este sistema en su forma matricial:

$$\begin{aligned} \dot{u}_{1,i} = & \left( \frac{D_1}{\Delta x^2} \right) Au_1 + \lambda(\omega I_1 - u_1) \\ & - \gamma(u_1 * u_2) + \left( \frac{D_1}{\Delta x^2} \right) b_1, \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} \dot{u}_{2,i} = & \left( \frac{D_2}{\Delta x^2} \right) Au_2 - \gamma(u_1 * u_2) \\ & + \left( \frac{D_2}{\Delta x^2} \right) b_2, \end{aligned} \quad (3.8)$$

donde  $u_k = [u_{k,1}, \dots, u_{k,n-1}]$  para  $k = 1, 2$ ,

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & -2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -2 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}, \quad (3.9)$$

$$b_1 = \begin{pmatrix} u_{1,0} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ u_{1,n} \end{pmatrix}, \quad b_2 = \begin{pmatrix} u_{2,0} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ u_{2,n} \end{pmatrix}, \quad I_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n-1) \times 1}, \quad (3.10)$$

y  $u_1 * u_2$  representa la multiplicación elemento a elemento de  $u_1$  y  $u_2$ .

Para resolver numéricamente el sistema de ecuaciones en derivadas parciales que hemos obtenido, utilizaremos el comando *NDSolve* de *Mathematica* sobre las ecuaciones discretizadas. Para más detalles del código empleado para implementar el método de líneas (MOL) para la resolución numérica de este sistema, ver el Apéndice C.

Además, como ya hemos comentado, vamos a considerar  $0 \leq x \leq 1$  y también  $0 \leq t \leq 10$ . Supondremos los parámetros  $\lambda = 3$ ,  $\omega = 1$  y  $\gamma = 1$ .

Fijaremos las condiciones de frontera en  $u_1(0, t) = u_1(1, t) = 1$  para la concentración de oxígeno disuelto y  $u_2(0, t) = u_2(1, t) = 0$  para la demanda bioquímica de oxígeno. Esto implica que en las orillas del río la concentración de oxígeno es máxima y no hay DBO, ya que consideramos que allí el agua estará completamente limpia. Además, las condiciones iniciales serán  $u_1(x, 0) = 1$ ,  $u_2(x, 0) = 6$ , esto significa que la demanda bioquímica de oxígeno será inicialmente 6 veces mayor que la concentración de oxígeno disuelto.

Procedemos a hacer simulaciones numéricas variando los coeficientes de difusión  $D_1$  y  $D_2$  pero manteniendo su ratio, para observar cómo evolucionan la concentración de oxígeno disuelto y la demanda bioquímica de oxígeno en función de ellos.

- Fijamos los coeficientes de difusión en  $D_1 = 0,001$ ,  $D_2 = 0,0001$  y obtenemos:

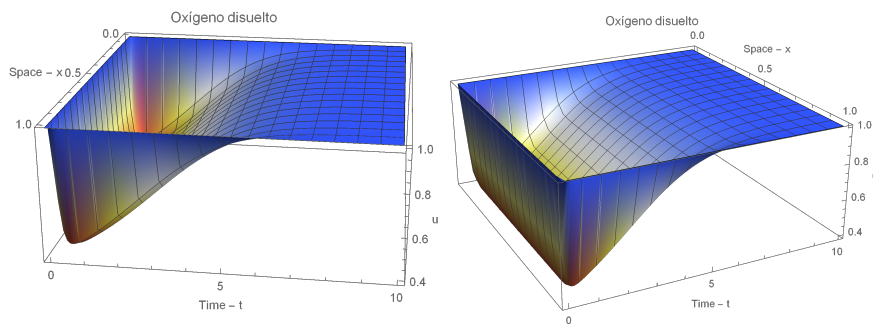


Figura 3.4: Concentración de oxígeno disuelto con  $D_1 = 0,001$ ,  $D_2 = 0,0001$ .

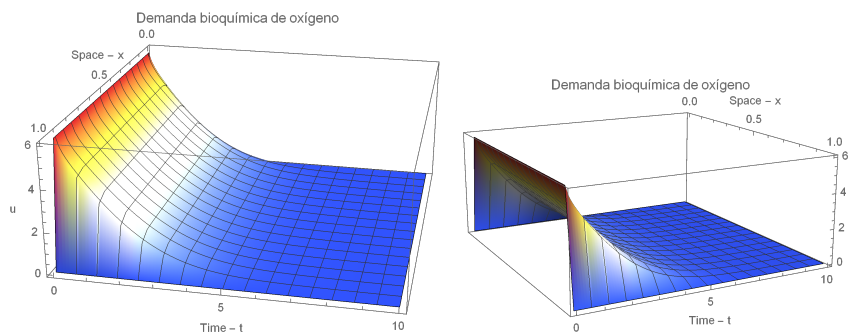


Figura 3.5: Demanda bioquímica de oxígeno con  $D_1 = 0,001$ ,  $D_2 = 0,0001$ .

En estas figuras podemos observar como inicialmente la concentración de oxígeno disuelto parte del valor de 1 y al introducir puntualmente

ciertas sustancias contaminantes con una demanda bioquímica 6 veces mayor que dicha concentración, esta desciende hasta cerca de 0,4. Cuando dichas sustancias se han desintegrado lo suficiente como para compensar su demanda de oxígeno con el obtenido por reaireación, la concentración de oxígeno disuelto se recupera tendiendo de nuevo a alcanzar su valor máximo de 1.

Por otra parte, es interesante ver como la consideración de que en las orillas el agua está limpia (esto es, concentración de oxígeno máxima y demanda bioquímica de oxígeno nula) impuesta por las condiciones de frontera ayuda en gran medida a la purificación del río, gracias a la difusión del agua limpia hacia el resto del caudal.

- Aumentando los coeficientes de difusión a  $D_1 = 0,1$ ,  $D_2 = 0,01$ , obtenemos:

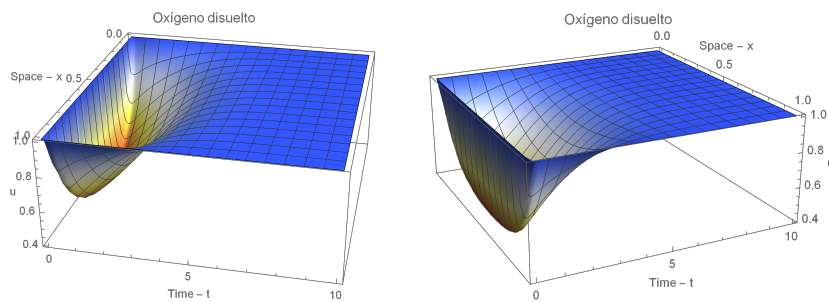


Figura 3.6: Concentración de oxígeno disuelto con  $D_1 = 0,1$ ,  $D_2 = 0,01$ .

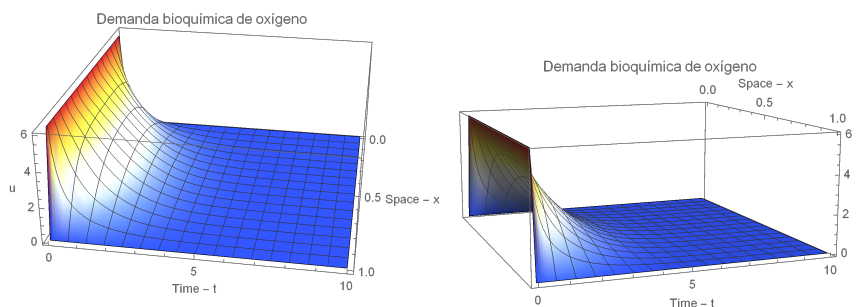


Figura 3.7: Demanda bioquímica de oxígeno con  $D_1 = 0,1$ ,  $D_2 = 0,01$ .

En este caso, al aumentar los coeficientes de difusión, podemos observar que la forma de las gráficas obtenidas es similar, lo cual implica que el proceso de purificación del río seguirá el mismo patrón. La prin-

cial diferencia será la velocidad y el impacto de este proceso.

Podemos observar que de nuevo la concentración inicial de oxígeno disuelto es 1 pero, introduciendo sustancias contaminantes con la misma demanda bioquímica de oxígeno que en el caso anterior, véase 6, se alcanza el pico de mínima concentración de oxígeno disuelto en un valor cercano a 0,6, más alto que en el caso anterior. Además, no solo el descenso en la concentración de oxígeno se reduce, sino que también es evidente cómo el proceso de re-oxigenación es más rápido y el río alcanza su nivel de saturación antes.

- Aumentando más aún los coeficientes de difusión a  $D_1 = 10$ ,  $D_2 = 1$  tenemos:

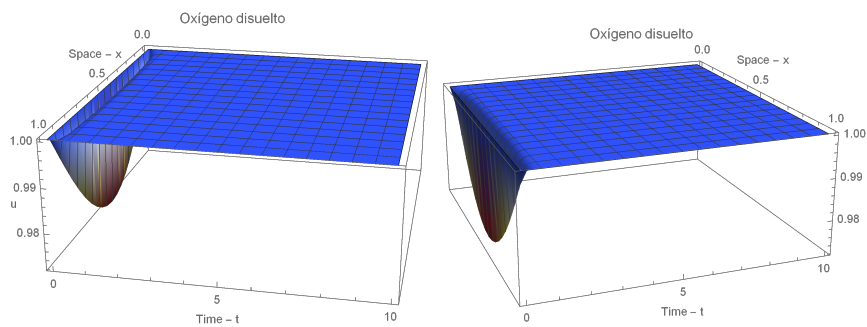


Figura 3.8: Concentración de oxígeno disuelto con  $D_1 = 10$ ,  $D_2 = 1$ .

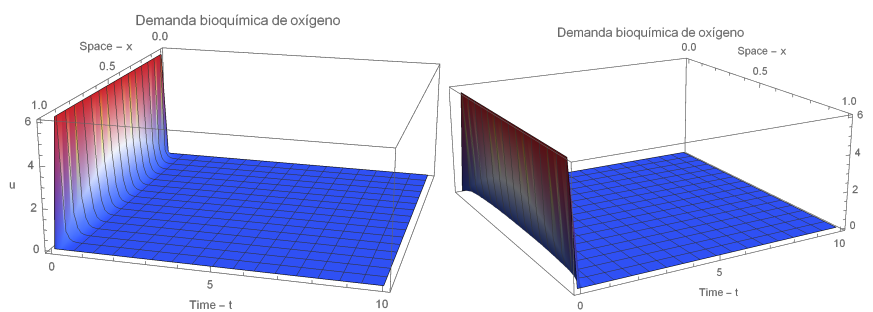


Figura 3.9: Demanda bioquímica de oxígeno con  $D_1 = 10$ ,  $D_2 = 1$ .

Con estas figuras podemos corroborar los resultados que concluimos en el caso anterior. De nuevo el patrón de purificación parece similar, pero en este caso podemos ver que, a pesar de seguir introduciendo sustancias contaminantes con la misma demanda bioquímica de oxígeno que en casos anteriores, la concentración de oxígeno disuelto solamente

desciende desde 1 hasta 0,98 aproximadamente. También es evidente la gran velocidad a la que desciende la demanda bioquímica de oxígeno con respecto a los ejemplos anteriores.

Con estos ejemplos podemos concluir que los coeficientes de difusión juegan un papel clave en la purificación del agua de los ríos. Hemos observado como a medida que estos coeficientes aumentan, no solo aumenta la velocidad a la cual la materia orgánica se oxida sino que también se reduce el impacto que produce la introducción de las sustancias contaminantes en el río. Esto significa que la concentración de oxígeno disuelto del río, ante la introducción de las mismas sustancias contaminantes, se reducirá en menor medida y se recuperará más rápido cuanto mayores sean los coeficientes de difusión del sistema.

## Apéndice A

# Código de Mathematica utilizado en el Capítulo 1

### A.1. Solución analítica del modelo de Streeter-Phelps

Para comprobar que las soluciones analíticas que hemos obtenido en la Sección 1.1.2 son correctas, utilizamos el comando *DSolve*, introduciendo las ecuaciones diferenciales correspondientes, la función en la que queremos resolver la ecuación y la variable independiente.

Dado que la ecuación diferencial referente a  $L(t)$  no depende de la otra función  $D(t)$ , podemos resolverla analíticamente de forma independiente. Teniendo la solución para  $L(t)$ , podemos sustituir su valor en la ecuación diferencial referente a  $D(t)$  y resolverla de nuevo con el comando *DSolve*.

A continuación se muestra el código utilizado:

```
Clear["Global`*"]
|borra
eq1 = {L'[t] == -K1 * L[t], L[0] == L0};
sol1 = DSolve[eq1, L[t], t]
|resolver diferencial
eq2 = {B'[t] == K1 * L0 * Exp[-K1 * t] - K2 * B[t], B[0] == B0};
|exponencial
sol2 = DSolve[eq2, B[t], t]
|resolver diferencial
```

### A.2. Simulaciones numéricas

En las gráficas del Capítulo 2 representamos las soluciones para  $L(t)$  y  $C(t)$  frente al tiempo. En particular debemos destacar que representamos

$C(t) = C_s - D(t)$  a pesar de que la segunda EDO que consideramos y resolvemos es para la función  $D(t)$ . Esto, tal y como explicamos en el texto del Capítulo 2, se debe a fines interpretativos.

- Figuras 1.1, 1.2 y 1.3.

En las figuras que se presentan en la Sección 1.1.2 podemos observar tanto las soluciones exactas para  $L(t)$  y  $C(t)$  como las aproximaciones numéricas para ellas.

Para representar las soluciones exactas necesitamos evaluar las funciones con la solución obtenida, en este caso con el comando *Evaluate*. Después de eso basta con utilizar el comando *Plot* marcando el intervalo temporal en el cual queremos representar.

```

K1 = 0.3;
K2 = 0.06;
L0 = 4.5;
B0 = 0;
Cs = 9;
plot11 = Plot[Evaluate[{L[t]} /. sol1], {t, 0, 55}, PlotRange -> All,
  [repr...|evalúa [rango de repr...|todo
  PlotStyle -> {Thick, RGBColor[0.880722, 0.611041, 0.142051]},
  [estilo de repr...|grueso [color RGB
  PlotLegends -> {"Solución exacta L(t)", AxesLabel -> Automatic};
  [leyendas de representación [etiqueta de e...|automático
plot12 = Plot[Evaluate[Cs - {B[t]} /. sol2], {t, 0, 55}, PlotRange -> All,
  [repr...|evalúa [rango de repr...|todo
  PlotStyle -> {Thick}, PlotLegends -> {"Solución exacta C(t)=Cs-D(t)"}];
  [estilo de repr...|grueso [leyendas de representación [constante |deriva
plot3 = Plot[S[t] = Cs, {t, 0, 55}, PlotStyle -> {Dashed, Gray}, PlotLegends -> {"Cs"}];
  [representación gráfica [estilo de repr...|rayado [gris [leyendas de representación

```

Por otra parte, para llevar a cabo las simulaciones numéricas lo primero es fijar los parámetros necesarios. Para conseguir la aproximación numérica de la solución para el modelo de Streeter-Phelps utilizamos el comando *NDSolve* introduciendo ambas ecuaciones a la vez.

```

eqs =
  {L'[t] == -K1 * L[t], B'[t] == K1 * L0 * Exp[-K1 * t] - K2 * B[t], L[0] == L0, B[0] == B0};
  [exponencial
sols = NDSolve[eqs, {L[t], B[t]}, {t, 0, 55}];
  [resolvidor diferencial numérico
plot21 = Plot[Evaluate[{L[t]} /. sols], {t, 0, 55},
  [repr...|evalúa
  PlotRange -> All, PlotStyle -> {Thick, LightRed, Dotted},
  [rango de repr...|todo [estilo de repr...|grueso [rojo claro [punteado
  PlotLegends -> {"Simulación numérica L(t)", AxesLabel -> Automatic};
  [leyendas de representación [etiqueta de e...|automático
plot22 = Plot[Evaluate[Cs - {B[t]} /. sols], {t, 0, 55}, PlotRange -> All, PlotStyle ->
  [repr...|evalúa [rango de repr...|todo [estilo de representación
  {Thick, Blue, Dotted}, PlotLegends -> {"Simulación numérica C(t)=Cs-D(t)"}];
  [grueso [azul [punteado [leyendas de representación [constante |deriva
Show[plot11, plot12, plot3, plot21, plot22]
  [muestra

```



Para recrear las figuras de cada caso, modificamos el parámetro denotado como  $B_0$  que hace referencia a la condición inicial  $D(0)$  dándole los valores 0, 4, 5 y 9 (esto implica  $C(0)$  tomando los valores 9, 4, 5 y 0 respectivamente) y mantenemos el resto del código igual.

- Figuras 1.4 y 1.5.

En estas figuras representamos las soluciones exactas para  $L(t)$  y  $C(t)$  considerando distintos valores iniciales  $L(0)$ .

Para representar cada una de estas funciones procedemos igual que en la sección anterior:

```

Cs = 9;
B0 = 6;

plot3 = Plot[S[t] = Cs, {t, 0, 55}, PlotStyle -> {Dashed, Gray}, PlotLegends -> {"Cs"}];
      |representación gráfica      |estilo de repre... |rayado |gris |leyendas de representación

L0 = 1;

plot11 = Plot[Evaluate[{L[t]} /. sol1], {t, 0, 55}, PlotRange -> All, PlotStyle ->
      |repr...|evalúa      |rango de repr... |todo |estilo de representación
      {Thick, RGBColor[0.880722, 0.611041, 0.142051]}, PlotLegends -> {"L(t)"}];
      |grueso |color RGB      |leyendas de representación

plot21 = Plot[Evaluate[Cs - {B[t]} /. sol2], {t, 0, 55}, PlotRange -> All,
      |repr...|evalúa      |rango de repr... |todo
      PlotStyle -> {Thick}, PlotLegends -> {"C(t)=Cs-D(t)"}];
      |estilo de repre... |grueso |leyendas de repres... |constante |deriva

```

Iremos almacenando cada gráfica en una variable para después mostrarlas todas juntas con el comando *Show*.

```

Show[plot11, plot12, plot13, plot14, plot15, plot16, plot17]
|muestra
Show[plot21, plot22, plot23, plot24, plot25, plot26, plot27, plot3]
|muestra

```



## Apéndice B

# Ejemplo de aplicación de la transformación simple para el método tanh

En este apéndice incluiremos un ejemplo de aplicación del método tanh con la transformación explicada en el Capítulo 2. Debido a que para nuestro sistema en concreto este método no fue eficaz, dejaremos aquí reflejados los cálculos correspondientes al sistema que aparece en [5] para que se pueda apreciar como ejemplo de aplicación.

El sistema que se considera es, al igual que el estudiado en este trabajo, un sistema de ecuaciones de difusión-reacción no lineales y ligadas. Representa la evolución de la concentración de dos ciertas sustancias  $u_1$  y  $u_2$  que reaccionan entre ellas.

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + u_1^2 u_2 - B u_1, \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} - u_1^2 u_2 + B u_1, \quad (\text{B.2})$$

donde  $B$  es un parámetro constante y  $\kappa$  representa el coeficiente de difusión de ambas sustancias.

Empezamos introduciendo la variable de onda viajera  $\zeta = c(x - \nu t)$ , de modo que tenemos  $u_1(x, t) = U(\zeta)$ ,  $u_2(x, t) = W(\zeta)$ . Introduciendo estos cambios en (B.1) y (B.2) transformamos el sistema de ecuaciones en derivadas parciales en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$c\nu \frac{dU}{d\zeta} + \kappa c^2 \frac{d^2 U}{d\zeta^2} + U^2 W - BU = 0, \quad (\text{B.3})$$

$$c\nu \frac{dW}{d\zeta} + \kappa c^2 \frac{d^2 W}{d\zeta^2} - U^2 W + BU = 0. \quad (\text{B.4})$$

Tal y como hemos explicado en el Capítulo 2 y gracias a la transformación que aparece en [6], proponemos los siguientes desarrollos como soluciones al sistema:

$$U(\eta) = \sum_{i=1}^n \cos^{i-1}(\eta)[B_i \sin(\eta) + A_i \cos(\eta)] + A_0, \quad (\text{B.5})$$

$$W(\eta) = \sum_{j=1}^m \cos^{j-1}(\eta)[B'_j \sin(\eta) + A'_j \cos(\eta)] + A'_0, \quad (\text{B.6})$$

con  $\sin[\eta(\zeta)] = \text{sech}(\zeta)$ ,  $\cos[\eta(\zeta)] = \tanh(\zeta)$  y  $\frac{d\eta}{d\zeta} = \sin(\eta)$ .

Considerando que los grados de estos polinomios trigonométricos son  $D(U) = n$  y  $D(W) = m$ , tenemos:

$$D\left(\frac{dU}{d\zeta}\right) = n + 1, \quad D\left(\frac{d^2U}{d\zeta^2}\right) = n + 2, \quad (\text{B.7})$$

$$D\left(\frac{dW}{d\zeta}\right) = m + 1, \quad D\left(\frac{d^2W}{d\zeta^2}\right) = m + 2, \quad (\text{B.8})$$

además de  $D(U^2W) = 2n + m$ . Con esto, equilibrando los grados en (B.3) y (B.4) concluimos que necesariamente:

$$D\left(\frac{d^2U}{d\zeta^2}\right) = D(U^2W) \Rightarrow n + 2 = 2n + m, \quad (\text{B.9})$$

$$D\left(\frac{d^2W}{d\zeta^2}\right) = D(U^2W) \Rightarrow m + 2 = 2n + m. \quad (\text{B.10})$$

De (B.9) y (B.10) tenemos  $n = m = 1$ , con lo cual las soluciones propuestas (B.5) y (B.6) resultan:

$$U(\eta) = A_0 + B_1 \sin(\eta) + A_1 \cos(\eta), \quad (\text{B.11})$$

$$W(\eta) = A'_0 + B'_1 \sin(\eta) + A'_1 \cos(\eta). \quad (\text{B.12})$$

De estos resultados podemos derivar explícitamente:

$$\begin{aligned} \frac{dU}{d\zeta} &= \frac{dU}{d\eta} \cdot \frac{d\eta}{d\zeta} = (B_1 \cos \eta - A_1 \sin \eta) \sin \eta \\ &= B_1 \sin \eta \cos \eta - A_1 \underbrace{\sin^2 \eta}_{1 - \cos^2 \eta} = \\ &= -A_1 + B_1 \cos \eta \sin \eta + A_1 \cos^2 \eta \end{aligned}$$

Análogamente:

$$\frac{dW}{d\zeta} = \frac{dW}{d\eta} \cdot \frac{d\eta}{d\zeta} = -A'_1 + B'_1 \sin \eta \cos \eta + A'_1 \cos^2 \eta$$

Y además:

$$\begin{aligned} \frac{d^2U}{d\zeta^2} &= \frac{d}{d\zeta} \left( \frac{dU}{d\zeta} \right) = \frac{d}{d\zeta} \left( -A_1 + B_1 \cos \eta \sin \eta + A_1 \cos^2 \eta \right) \\ &= \frac{d}{d\eta} \left( -A_1 + B_1 \cos \eta \sin \eta + A_1 \cos^2 \eta \right) \cdot \frac{d\eta}{d\zeta} \\ &= \left( B_1 (\cos^2 \eta - \underbrace{\sin^2 \eta}_{1-\cos^2 \eta}) - 2A_1 \cos \eta \sin \eta \right) \cdot \sin \eta \\ &= 2B_1 \cos^2 \eta \sin \eta - B_1 \sin \eta - 2A_1 \cos \eta \underbrace{\sin^2 \eta}_{1-\cos^2 \eta} \\ &= -B_1 \sin \eta - 2A_1 \cos \eta + 2B_1 \cos^2 \eta \sin \eta + 2A_1 \cos^3 \eta \end{aligned}$$

Y de igual manera:

$$\frac{d^2W}{d\zeta^2} = \frac{d}{d\zeta} \left( \frac{dW}{d\zeta} \right) = -B'_1 \sin \eta - 2A'_1 \cos \eta + 2B'_1 \cos^2 \eta \sin \eta + 2A'_1 \cos^3 \eta$$

Teniendo estas expresiones, procedemos a sustituirlas en el sistema para calcular los coeficientes  $A_0, A'_0, A_1, B_1, A'_1, B'_1$ . Comenzamos sustituyendo en (B.3):

$$\begin{aligned} & \nu \left( -A_1 + B_1 \cos \eta \sin \eta + A_1 \cos^2 \eta \right) \\ & + \kappa c^2 \left( -B_1 \sin \eta - 2A_1 \cos \eta + 2B_1 \cos^2 \eta \sin \eta + 2A_1 \cos^3 \eta \right) \\ & + (A_0 + B_1 \sin \eta + A_1 \cos \eta)^2 (A'_0 + B'_1 \sin \eta + A'_1 \cos \eta) \\ & - B(A_0 + B_1 \sin \eta + A_1 \cos \eta) = 0 \end{aligned}$$

De donde operando, aplicando relaciones trigonométricas y agrupando términos semejantes obtenemos:

$$\begin{aligned} & \nu \left( -A_1 + B_1 \cos \eta \sin \eta + A_1 \cos^2 \eta \right) + \kappa c^2 \left( -B_1 \sin \eta - 2A_1 \cos \eta \right. \\ & \left. + 2B_1 \cos^2 \eta \sin \eta + 2A_1 \cos^3 \eta \right) + \{ [A'_0(A_0^2 + B_1^2) + 2A_0B_1B'_1 - BA_0] \\ & + [2A_0A'_0B_1 + B'_1(A_0^2 + B_1^2) - BB_1] \sin \eta + [2A_0A'_0A_1 + 2A_1B_1B'_1 \\ & + A'_1(A_0^2 + B_1^2) - BA_1] \cos \eta + [2A'_0A_1B_1 + 2A_0A_1B'_1 + 2A_0A'_1B_1] \\ & \cdot \cos \eta \sin \eta + [A'_0(A_1^2 - B_1^2) - 2A_0B_1B'_1 + 2A_0A_1A'_1] \cos^2 \eta + [B'_1(A_1^2 - B_1^2) \\ & + 2A_1A'_1B_1] \cos^2 \eta \sin \eta + [A'_1(A_1^2 - B_1^2) - 2A_1B_1B'_1] \cos^3 \eta \} = 0 \end{aligned}$$

Ahora podemos asegurar que para que esta igualdad se cumpla, los coeficientes de cada uno de los términos trigonométricos deben ser cero:

$$\text{constante :} \quad -c\nu A_1 + A'_0(A_0^2 + B_1^2) + 2A_0B_1B'_1 - BA_0 = 0 \quad (\text{B.13})$$

$$\sin \eta : \quad -\kappa c^2 B_1 + B'_1(A_0^2 + B_1^2) + 2A_0A'_0B_1 - BB_1 = 0 \quad (\text{B.14})$$

$$\cos \eta : \quad -2\kappa c^2 A_1 + A'_1(A_0^2 + B_1^2) + 2A_0A'_0A_1 + 2A_1B_1B'_1 - BA_1 = 0 \quad (\text{B.15})$$

$$\cos \eta \sin \eta : \quad c\nu B_1 + 2A'_0A_1B_1 + 2A_0A_1B'_1 + 2A_0A'_1B_1 = 0 \quad (\text{B.16})$$

$$\cos^2 \eta : \quad c\nu A_1 + A'_0(A_1^2 - B_1^2) - 2A_0B_1B'_1 + 2A_0A_1A'_1 = 0 \quad (\text{B.17})$$

$$\cos^2 \eta \sin \eta : \quad 2\kappa c^2 B_1 + B'_1(A_1^2 - B_1^2) + 2A_1A'_1B_1 = 0 \quad (\text{B.18})$$

$$\cos^3 \eta : \quad 2\kappa c^2 A_1 + A'_1(A_1^2 - B_1^2) - 2A_1B_1B'_1 = 0 \quad (\text{B.19})$$

Equivalentemente, sustituyendo las expresiones derivadas de  $W$  en (B.4), operando, agrupando términos e igualando a cero cada coeficiente tendremos lo siguiente:

$$\text{constante :} \quad -c\nu A'_1 - A'_0(A_0^2 + B_1^2) - 2A_0B_1B'_1 + BA_0 = 0 \quad (\text{B.20})$$

$$\sin \eta : \quad -\kappa c^2 B'_1 - B'_1(A_0^2 + B_1^2) - 2A_0A'_0B_1 + BB_1 = 0 \quad (\text{B.21})$$

$$\cos \eta : \quad -2\kappa c^2 A'_1 - A'_1(A_0^2 + B_1^2) - 2A_0A'_0A_1 - 2A_1B_1B'_1 + BA_1 = 0 \quad (\text{B.22})$$

$$\cos \eta \sin \eta : \quad c\nu B'_1 - 2A'_0A_1B_1 - 2A_0A_1B'_1 - 2A_0A'_1B_1 = 0 \quad (\text{B.23})$$

$$\cos^2 \eta : \quad c\nu A'_1 - A'_0(A_1^2 - B_1^2) + 2A_0B_1B'_1 - 2A_0A_1A'_1 = 0 \quad (\text{B.24})$$

$$\cos^2 \eta \sin \eta : \quad 2\kappa c^2 B'_1 - B'_1(A_1^2 - B_1^2) - 2A_1A'_1B_1 = 0 \quad (\text{B.25})$$

$$\cos^3 \eta : \quad 2\kappa c^2 A'_1 - A'_1(A_1^2 - B_1^2) + 2A_1B_1B'_1 = 0 \quad (\text{B.26})$$

Con esto, obtenemos un sistema formado por las ecuaciones (B.13) a (B.19) y (B.20) a (B.26), el cual podremos resolver para obtener el valor de nuestros coeficientes.

Para simplificar el sistema, podemos operar de la siguiente manera:

$$(B.13) + (B.20) \Rightarrow c\nu(A_1 + A'_1) = 0, \quad (B.27)$$

$$(B.14) + (B.21) \Rightarrow \kappa c^2(B_1 + B'_1) = 0, \quad (B.28)$$

$$(B.15) + (B.22) \Rightarrow \kappa c^2(A_1 + A'_1) = 0, \quad (B.29)$$

$$(B.16) + (B.23) \Rightarrow c\nu(B_1 + B'_1) = 0. \quad (B.30)$$

Ahora bien, dado que  $\kappa c^2 \neq 0$ , necesariamente de (B.28) y (B.29) deducimos:

$$A'_1 = A_1, \quad B'_1 = B_1. \quad (B.31)$$

Sin embargo, de (B.27) y (B.30) obtenemos dos posibles casos:

- (i)  $\nu = 0$ , lo cual resultará en una solución estática. Sustituimos este valor y las igualdades (B.31) en las ecuaciones (B.13) a (B.19) y obtenemos:

$$A_0^2 A'_0 + B_1^2 (A'_0 - 2A_0) - BA_0 = 0, \quad (B.32)$$

$$- \kappa c^2 B_1 + 2A_0 A'_0 B_1 - A_0^2 B_1 - B_1^3 - BB_1 = 0, \quad (B.33)$$

$$- 2\kappa c^2 A_1 + 2A_0 A'_0 A_1 - A_0^2 A_1 - 3A_1 B_1^2 - BA_1 = 0, \quad (B.34)$$

$$A_1 B_1 (A'_0 - 2A_0) = 0, \quad (B.35)$$

$$A'_0 (A_1^2 - B_1^2) + 2A_0 B_1^2 - 2A_0 A_1^2 = 0, \quad (B.36)$$

$$2\kappa c^2 B_1 - 3A_1^2 B_1 + B_1^3 = 0, \quad (B.37)$$

$$2\kappa c^2 A_1 - A_1^3 + 3A_1 B_1^2 = 0. \quad (B.38)$$

De (B.35) tenemos de nuevo dos posibilidades:

- a)  $A_1 B_1 \neq 0$  y  $A'_0 = 2A_0$ . Sustituyendo esto en (B.32) tenemos:

$$A_0(A_0 A'_0 - B) = 0, \quad (B.39)$$

que de nuevo resulta en dos posibles casos:

- 1)  $A_0 \neq 0$  y  $A_0 A'_0 = B$ . Esto, junto con la anterior restricción de  $A'_0 = 2A_0$ , concluimos que:

$$A_0 = \pm \sqrt{\frac{B}{2}}, \quad A'_0 = \pm 2\sqrt{\frac{B}{2}}. \quad (B.40)$$

Sustituyendo estos valores en (B.33), (B.34) y (B.38) obtenemos:

$$A_1 = \pm \sqrt{\frac{B}{2}}, \quad B_1 = \pm \sqrt{\frac{B}{2}}, \quad c = \pm \sqrt{\frac{B}{\kappa}} \quad (B.41)$$

Con estos coeficientes, las soluciones propuestas en este caso resultan:

$$U(\eta) = \pm \sqrt{\frac{B}{2}}(1 + \sin \eta + \cos \eta) \quad (\text{B.42})$$

$$W(\eta) = \pm \sqrt{\frac{B}{2}}(2 - \sin \eta - \cos \eta) \quad (\text{B.43})$$

Y finalmente las soluciones estáticas que buscábamos son:

$$u_1(x, t) = \pm \sqrt{\frac{B}{2}} \left[ 1 + \operatorname{sech} \left( \sqrt{\frac{B}{\kappa}} x \right) \pm \tanh \left( \sqrt{\frac{B}{\kappa}} x \right) \right] \quad (\text{B.44})$$

$$u_2(x, t) = \pm \sqrt{\frac{B}{2}} \left[ 2 - \operatorname{sech} \left( \sqrt{\frac{B}{\kappa}} x \right) \mp \tanh \left( \sqrt{\frac{B}{\kappa}} x \right) \right] \quad (\text{B.45})$$

- 2)  $A_0 = 0$  y  $A_0 A'_0 \neq B$ . De la restricción anterior  $A'_0 = 2A_0$  obtenemos  $A'_0 = 0$ . Así, las ecuaciones de (B.32) a (B.38) resultan:

$$-\kappa c^2 - B_1^2 - B = 0, \quad (\text{B.46})$$

$$-2\kappa c^2 - 3B_1^2 - B = 0, \quad (\text{B.47})$$

$$2\kappa c^2 - 3A_1^2 + B_1^2 = 0, \quad (\text{B.48})$$

$$2\kappa c^2 - A_1^2 + 3B_1^2 = 0. \quad (\text{B.49})$$

Restando (B.49) y (B.48) y también (B.46) y (B.47) obtenemos:

$$A_1^2 = -B_1^2 = \frac{\kappa c^2}{2}, \quad (\text{B.50})$$

y sustituyendo estos valores en (B.46) resultan los coeficientes:

$$A_1 = \pm i\sqrt{B}, \quad B_1 = \pm \sqrt{B}, \quad c = \pm i\sqrt{\frac{2B}{\kappa}}. \quad (\text{B.51})$$

Con estos resultados, podemos concluir que las soluciones estáticas para este caso serán:

$$u_1(x, t) = \pm \sqrt{B} \left[ \sec \left( \sqrt{\frac{2B}{\kappa}} x \right) \mp \tan \left( \sqrt{\frac{2B}{\kappa}} x \right) \right], \quad (\text{B.52})$$

$$u_2(x, t) = \mp \sqrt{B} \left[ \sec \left( \sqrt{\frac{2B}{\kappa}} x \right) \mp \tan \left( \sqrt{\frac{2B}{\kappa}} x \right) \right]. \quad (\text{B.53})$$



- b)  $A_1 B_1 = 0$  y  $A'_0 = 2A_0$ . Supondremos  $A_1 \neq 0$ ,  $B_1 = 0$ . La ecuación (B.32) resulta:

$$A_0(A_0 A'_0 - B) = 0, \quad (\text{B.54})$$

y nos abre de nuevo dos posibilidades:

- 1)  $A_0 \neq 0$  y  $A_0 A'_0 = B$ , de donde concluimos gracias a la restricción  $A'_0 = 2A_0$  los siguientes coeficientes:

$$A_0 = \pm \sqrt{\frac{B}{2}}, \quad A'_0 = \pm 2\sqrt{\frac{B}{2}}. \quad (\text{B.55})$$

Sustituyendo estos valores en (B.34) y (B.38) obtenemos:

$$A_1 = \pm \sqrt{\frac{B}{2}}, \quad c = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{B}{\kappa}}. \quad (\text{B.56})$$

Habiendo determinado estos coeficientes, podemos concluir que las soluciones estáticas en este caso serán:

$$u_1(x, t) = \pm \sqrt{\frac{B}{2}} \left[ 1 + \tanh \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{B}{\kappa}} x \right) \right], \quad (\text{B.57})$$

$$u_2(x, t) = \pm \sqrt{\frac{B}{2}} \left[ 2 - \tanh \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{B}{\kappa}} x \right) \right]. \quad (\text{B.58})$$

- 2)  $A_0 = 0$  y  $A_0 A'_0 \neq B$ , de donde de nuevo tenemos  $A'_0 = 0$ . De (B.34) y (B.38) tenemos:

$$c = \pm i \sqrt{\frac{B}{2\kappa}}, \quad A_1 = \pm i \sqrt{B}, \quad (\text{B.59})$$

con lo que las soluciones estáticas resultan:

$$u_1(x, t) = \mp \sqrt{B} \tan \left( \sqrt{\frac{B}{2\kappa}} x \right), \quad (\text{B.60})$$

$$u_2(x, t) = \pm \sqrt{B} \tan \left( \sqrt{\frac{B}{2\kappa}} x \right). \quad (\text{B.61})$$

- (ii)  $\nu \neq 0$ , resultará en soluciones dinámicas. Suponemos  $B_1 = 0$  y  $A_1 \neq 0$ . Sustituyendo (B.31) en las ecuaciones de (B.13) a (B.19) obtenemos:

$$-c\nu A_1 + A_0^2 A'_0 - B A_0 = 0, \quad (\text{B.62})$$

$$-2\kappa c^2 + 2A_0 A'_0 - A_0^2 - B = 0, \quad (\text{B.63})$$

$$c\nu + A'_0 A_1 - 2A_0 A_1 = 0, \quad (\text{B.64})$$

$$2\kappa c^2 - A_1^2 = 0. \quad (\text{B.65})$$

Despejando  $A_1$  de (B.65) y sustituyéndolo en (B.63), al igual que operando con (B.62) y (B.64), obtenemos expresiones para  $A'_0$  que podemos igualar:

$$A'_0 = \frac{A_0(2A_1^2 + B)}{(A_1^2 + A_0^2)} = \frac{A_1^2 + A_0^2 + B}{2A_0}, \quad (\text{B.66})$$

de donde obtenemos la ecuación:

$$(A_1^2 - A_0^2)[A_1^2 - A_0^2 + B] = 0, \quad (\text{B.67})$$

de la cual separamos una vez más dos posibilidades:

- a)  $A_1^2 \neq A_0^2$  y  $A_0^2 = A_1^2 + B$ . Sustituyendo esta última restricción en (B.66), (B.64) y (B.65) obtenemos los coeficientes que buscamos:

$$A_0 = \sqrt{A_1^2 + B}, \quad A'_0 = \frac{A_1^2}{\sqrt{A_1^2 + B}}, \quad (\text{B.68})$$

$$c = \frac{A_1}{\sqrt{2\kappa}}, \quad \nu = \frac{\sqrt{2\kappa}(A_1^2 + 2B)}{\sqrt{A_1^2 + B}}. \quad (\text{B.69})$$

Con ellos, sustituyéndolos en las ecuaciones:

$$u_1(x, t) = A_0 + A_1 \tanh(c(x - \nu t)), \quad (\text{B.70})$$

$$u_2(x, t) = A'_0 - A_1 \tanh(c(x - \nu t)), \quad (\text{B.71})$$

obtenemos las soluciones dinámicas para este caso.

- b)  $A_1^2 = A_0^2$  y  $A_1^2 - A_0^2 + B \neq 0$ . De nuevo, sustituyendo en (B.66), (B.64) y (B.65) obtenemos los coeficientes:

$$A_0 = A_1, \quad A'_0 = \frac{2A_1^2 + B}{2A_1}, \quad (\text{B.72})$$

$$c = \frac{A_1}{\sqrt{2\kappa}}, \quad \nu = \frac{\sqrt{2\kappa}(2A_1^2 - B)}{2A_1}. \quad (\text{B.73})$$

Sustituyendo estos coeficientes en las siguientes expresiones:

$$u_1(x, t) = A_1[1 + \tanh(c(x - \nu t))], \quad (\text{B.74})$$

$$u_2(x, t) = A'_0 - A_1 \tanh(c(x - \nu t)), \quad (\text{B.75})$$

obtenemos las soluciones dinámicas que buscábamos.

## Apéndice C

# Código de Mathematica utilizado en el Capítulo 3

### C.1. Simulación numérica para difusión nula

En el caso de difusión nula tenemos un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que resolvemos numéricamente aplicando de manera directa el comando *NDSolve*. En él especificamos las condiciones iniciales, el intervalo temporal a considerar y el paso que utilizaremos para discretizar el sistema. Además, aplicaremos la opción *Method*  $\rightarrow$   $\{$ "*ExplicitRungeKutta*", "*DifferenceOrder*"  $\rightarrow$  4  $\}$  para especificar que queremos utilizar un método Runge-Kutta de orden 4.

El código utilizado es el siguiente:

```
 $\lambda = 3;$   
 $\omega = 1;$   
 $K2 = 1;$   
 $tend = 10;$   
 $t0 = 0;$   
 $M = 200;$   
 $tstep = (tend - t0) / M;$   
  
 $sol1 = NDSolve[$   
     $[$   
         $u1'[t] == \lambda * (\omega - u1[t]) - K2 * u1[t] * u2[t],$   
         $u2'[t] == -K2 * u1[t] * u2[t],$   
         $u1[0] == 1,$   
         $u2[0] == 6],$   
     $\{u1, u2\}, \{t, 0, tend, tstep\},$   
     $Method \rightarrow \{$ "ExplicitRungeKutta", "DifferenceOrder"  $\rightarrow$  4 $\}$   
  
 $Plot[Evaluate[\{u1[t], u2[t]\} /. sol1], \{t, 0, tend\}, PlotRange \rightarrow All,$   
 $PlotLegends \rightarrow \{$ " $u_1(t)$ ", " $u_2(t)$ " $\}, AxesLabel \rightarrow Automatic]$ 
```

Para cada uno de los demás casos modificamos la condición inicial  $u_1(0)$  dentro de las ecuaciones del comando *NDSolve*. Le daremos los valores 1, 0, 5 y 0 y obtendremos las figuras 3.1, 3.2 y 3.3 respectivamente.

## C.2. Simulación numérica para difusión no nula

En el caso de difusión no nula tenemos un sistema de ecuaciones en derivadas parciales. Para resolverlo utilizamos el método de líneas (MOL) discretizando primero la variable espacial  $x$  para obtener un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias y aplicándole a este el comando *NDSolve*. En particular el código utilizado es el siguiente:

```

λ = 3;
ω = 1;
γ = 1;
D1 = 0.001;
D2 = 0.0001;
x1 = 0.0; xr = 1;

n = 21;
dx = ((xr - x1) / (n - 1));
dx2 = dx^2;

t0 = 0.0; tf = 10;
u1l = 1; u1r = 1;
u2l = 0; u2r = 0;

yy1[i_][0] := u10[x] /. x → x1 + (i - 1) dx;
u10[xx_] := 1;
yy2[i_][0] := u20[x] /. x → x1 + (i - 1) dx;
u20[xx_] := 6

eqns = {Table[u1[i]'[t] == D1 (u1[i + 1][t] - 2 u1[i][t] + u1[i - 1][t]) / dx2 +
tabla
    λ * (ω - u1[i][t]) - γ * u1[i][t] * u2[i][t], {i, 2, n - 1}],
Table[u2[i]'[t] == D2 (u2[i + 1][t] - 2 u2[i][t] + u2[i - 1][t]) / dx2 -
tabla
    γ * u1[i][t] * u2[i][t], {i, 2, n - 1}],
u1[1][t] == u1l,
u1[n][t] == u1r,
u2[1][t] == u2l,
u2[n][t] == u2r,
Table[u1[i][0] == u10[x] /. x → x1 + (i - 1) dx, {i, 2, n - 1}],
tabla
Table[u2[i][0] == u20[x] /. x → x1 + (i - 1) dx, {i, 2, n - 1}]
tabla
};

vars = {Table[u1[i][t], {i, n}], Table[u2[i][t], {i, n}]};
tabla
tabla
varsu1 = vars[[1]];
varsu2 = vars[[2]];

```

```

sol1 = NDSolve[eqns, vars, {t, 0, tf}];
      [resolvidor diferencial numérico]
solu1 = {sol1[[1]][[1]]};
solu2 = {sol1[[1]][[2]]};

solnum = Evaluate[vars /. First[sol1]];
      [evalúa] [primero]
solnum1 = Evaluate[varsu1 /. First[solu1]];
      [evalúa] [primero]
solnum2 = Evaluate[varsu2 /. First[solu2]];
      [evalúa] [primero]

ListPlot3D[Table[solnum1, {t, 0., tf, 0.1}], DataRange -> {{x1, xr}, {0, tf}},
[representac... [tabla] [rango de datos]
  PlotRange -> Full, ColorFunction -> (ColorData[{"TemperatureMap", "Reverse"}][#3] &),
      [com... [función de color] [datos de colores] [invierte orden]
  Ticks -> Automatic, AxesLabel -> {"x", "t", "u"}, Axes -> True]
      [automático] [etiqueta de ejes] [ejes] [verdadero]

ListPlot3D[Table[solnum2, {t, 0., tf, 0.1}], DataRange -> {{x1, xr}, {0, tf}},
[representac... [tabla] [rango de datos]
  PlotRange -> Full, ColorFunction -> (ColorData["TemperatureMap"][#3] &),
      [com... [función de color] [datos de colores]
  Ticks -> Automatic, AxesLabel -> {"x", "t", "u"}, Axes -> True]
      [automático] [etiqueta de ejes] [ejes] [verdadero]

```

En este caso, para conseguir las figuras referentes a los diferentes casos, variamos los parámetros  $D_1$  y  $D_2$  referentes a los coeficientes de difusión, dándoles los parámetros  $D_1 = 0,001$ ,  $D_2 = 0,0001$  para las figuras 3.4 y 3.5,  $D_1 = 0,1$ ,  $D_2 = 0,01$  para las figuras 3.6 y 3.7 y  $D_1 = 10$ ,  $D_2 = 1$  para las figuras 3.8 y 3.9.



# Bibliografía

- [1] H .W. Streeter, E. B. Phelps, *A Study of the Pollution and Natural Purification of the Ohio River*, U.S. Public Health Service, Bulletin No. 146, 1925.
- [2] Tsegaye Simon, Purnachandra Rao Koya, *Numerical Simulation of System of Time-Dependant Advection-Diffusion-Reaction Equations Describing River Pollution*, International Journal of Scientific Progress and Research, Vol. 30, No. 02, 2016, pp. 94-106.
- [3] Tsegaye Simon, Purnachandra Rao Koya, *Modeling and Numerical Simulation of River Pollution Using Diffusion-Reaction Equation*, American Journal of Applied Mathematics, Vol. 3, No. 6, 2015, pp. 335-340.
- [4] Tsegaye Simon, Purnachandra Rao Koya, *Studying the Effects of Reaction, Diffusion and Reaireation on River Pollution Using Numerical Simulation of Diffusion-Reaction Equations*, IOSR Journal of Mathematics, Vol. 13, 2017, pp. 30-36.
- [5] A. H. Khater, W. Malfliet, D. K. Callebaut, E. S. Kamel, *The tanh method, a simple transformation and exact analytical solutions for nonlinear reaction–diffusion equations*, Chaos, Solitons & Fractals. Vol. 14, 2002, pp. 513-522.
- [6] Chuntao Yan, *A simple transformation for nonlinear waves*, Physics Letters A, Vol. 224, 1996, pp. 77-84.
- [7] J. G. Egbe, J. C. Agunwamba, E. E. Okon, *Modeling and Modification of the Effect of Self Purification of Kwa River Pollution*, International Journal of Current Research and Academic Review, Vol. 6, No. 9, 2018, pp. 83-89.

