

# IMPLEMENTACIÓN DE UN MÉTODO C.N. TRAPEZOIDAL DE VOLÚMENES FINITOS PARA LA SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL PROCESO DE MIGRACIÓN UNIDIMENSIONAL DE UNA CADENA RADIACTIVA

\*ÁNGEL BALAGUER,

\*\*CARLOS CONDE,

\*JOSÉ A. LÓPEZ

y

\*VICENT MARTÍNEZ

\* *Universitat Jaume I, Departament de Matemàtiques, Castellón, Spain*

\*\* *U.P.M., E.T.S.I. Minas, Depto. de Matemática Aplicada y M.I., Madrid, Spain*

## RESUMEN

Se ha simulado el proceso de transporte unidimensional en la geosfera de sustancias radiactivas mediante un esquema numérico basado en el método de volúmenes finitos y el esquema de Crank-Nicolson. Se ha efectuado un estudio del comportamiento del esquema en casos en los que domina el fenómeno convectivo, comparando con las soluciones obtenidas con un código numérico basado en una combinación del método de características y diferencias finitas.

## SUMMARY

It has simulated the onedimensional radioactive substances transport process runing in the geosphere by a numerical scheme that is based on the finite volume method and the Crank-Nicolson scheme. A study of the scheme behaviour has been carry out for advection dominate cases, comparing with the solutions obtained by a numerical code based on a combination of characteristics and finite diference methods.

## INTRODUCCIÓN

Es indudable que el análisis de seguridad de un almacenamiento potencial de residuos radiactivos conlleva numerosos estudios que garanticen que la radioactividad a él debida no causa daños en los seres vivos que habiten en el entorno del almacenamiento. Dado el enorme periodo de tiempo de la vida de ciertos isótopos radiactivos, la simulación numérica juega un importante papel en dichos estudios.

Recibido: Abril 1994

Uno de los fenómenos que deben analizarse en el estudio de tales almacenamientos es el proceso de migración a través de la geosfera. Dicho fenómeno se produce una vez destruidas las barreras de ingeniería (matriz, contenedor y blindajes de las galerías que contienen los isótopos radiactivos) cuando los radioisótopos entran en contacto con corrientes de agua subterránea que son capaces de disolverlos y arrastrarlos. Y ello ocurre al tener las barreras de ingeniería un periodo de vida inferior al de algunos isótopos radiactivos presentes.

En el presente trabajo se ha modelizado el mecanismo de transporte de radionúclidos por medio de corrientes de agua, que permite conocer la contaminación radiactiva en todo momento y en todo punto del entorno del almacenamiento, conocida la cantidad de radionúclidos liberada del almacenamiento y la velocidad del flujo de agua subterránea. Este estudio adquiere una especial importancia en el caso de un almacenamiento de residuos de alta actividad al ser estos los de mayor periodo de vida y más intensas radiaciones.

Hay pocas situaciones prácticas en las cuales existe una solución analítica del sistema de ecuaciones en derivadas parciales que rige el modelo de transporte, aún en el caso unidimensional al que nos restringimos. Por otro lado, la mayor parte de los esquemas numéricos que resuelven dicho problema están basados en los métodos de diferencias finitas o elementos finitos (ver Conde et al.<sup>7</sup>). Sin embargo las soluciones con ellos obtenidas presentan dos tipos de problemas en situaciones en las que el término convectivo domina sobre el difusivo:

- 1) Difusión numérica, que en términos de resultados numéricos produce la apariencia de un aumento de la difusión física.
- 2) Falsas oscilaciones numéricas.

Dichos errores se pueden evitar usando incrementos espaciales y temporales más pequeños, pero ello requiere un mayor esfuerzo computacional. Otra alternativa es usar esquemas que combinan el método de características con algún método en diferencias finitas o elementos finitos. Pero cuando se trata de extender tales métodos al caso de dos o tres dimensiones, la resolución del sistema de ecuaciones en derivadas parciales mediante el método de características se vuelve muy compleja tanto desde el punto de vista analítico como computacional según se razona en Johnson<sup>9</sup>.

En este trabajo se presentan detalles del desarrollo e implementación de un esquema numérico basado en el método de volúmenes finitos para la discretización espacial, con el doble objetivo de mostrar el buen comportamiento del método en la resolución del problema unidimensional y establecer una metodología que, dada la sencillez del método, pueda ser ampliada al caso de varias dimensiones. Sus resultados serán comparados con los del código de cálculo COLUMN2 (ver Bo et al.<sup>4</sup>) que está basado en una combinación de un método de características con diferencias finitas. Otro tipo de esquemas con volúmenes finitos aplicados a la resolución del problema de transporte pueden encontrarse en Balaguer et al.<sup>2</sup>.

Entre las ventajas principales del esquema numérico que aquí se presenta, respecto a otros ya existentes, destaca el tratamiento de cualquier tipo de condiciones de contorno, que permiten su acoplamiento con un modelo de término fuente capaz de proporcionar

la concentración de radionúclidos liberada del almacenamiento y disuelta en el agua. Además permite resolver problemas con coeficientes variables en función de cada punto espacial y cada instante temporal.

## MODELIZACIÓN MATEMÁTICA DEL PROBLEMA FÍSICO

Se va a estudiar el movimiento de varias sustancias radiactivas a través de un medio poroso. Si se considera un fluido atravesando el medio poroso, es sabido (ver por ejemplo Conde & Elorza<sup>6</sup>) que la evolución de una sustancia radiactiva transportada en el seno del fluido sigue dos tipos de mecanismos físico-químicos: conservativos y no conservativos.

En este trabajo los mecanismos que se consideran son, entre los conservativos, los de convección, difusión molecular y dispersión hidrodinámica, y entre los no conservativos, adsorción, desintegración, filiación radiactiva, reacciones químicas de primer orden y reacciones de precipitación-disolución.

Todos estos fenómenos se pueden modelizar, en el caso de una dimensión, mediante el siguiente sistema de ecuaciones en derivadas parciales (ver Balaguer<sup>1</sup>):

$$\begin{aligned} \frac{\partial(a_l(x,t)u_l)}{\partial t} + \frac{\partial(v(x,t)u_l)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}(k(x,t)\frac{\partial u_l}{\partial x}) \\ + q_l(x,t)u_l - \sum_{k \neq l} \Gamma^{k \rightarrow l} u_k = f_l(x,t) \end{aligned} \quad (1)$$

$$\forall l = 1, \dots, NE, \quad \forall x \in ]0, L[, \quad \forall t \in ]0, T[$$

habiendo definido:

$$\begin{aligned} q_l(x,t) &= \lambda_l a_l(x,t) + \sum_{k \neq l} r^{l \rightarrow k} \\ \Gamma^{(l-1) \rightarrow l}(x,t) &= \lambda_{l-1} \cdot a_{l-1}(x,t) + r^{(l-1) \rightarrow l} \\ \Gamma^{k \rightarrow l} &= r^{k \rightarrow l} \quad \forall k \neq l, \forall k \neq (l-1) \\ f_l &= f_l/w_c \end{aligned}$$

donde " $u_l(x,t)$ "  $\forall l = 1, \dots, NE$  son las funciones incógnitas y representan la concentración de cada isótopo " $l$ ", siendo  $NE$  el número de radionúclidos presentes que será igual al número de ecuaciones a resolver. El resto de funciones que aparecen en (1) se suponen conocidas y vienen dadas por cada uno de los fenómenos físico-químicos considerados:

" $a_l(x,t)$ " es el coeficiente de retención, " $w_c$ " es el coeficiente de porosidad cinemática, " $v(x,t)$ " es la velocidad del agua en los poros, " $k(x,t)$ " es la suma del coeficiente de difusión y del tensor de dispersión cinemática, " $\lambda_l$ " es la constante de desintegración radiactiva del isótopo " $l$ ", " $r^{k \rightarrow l}$ " es la constante de velocidad de la reacción química directa entre el isótopo " $k$ " y el isótopo " $l$ " y " $f_l$ " recoge la no conservación de materia en el balance de flujos.

Se ha considerado una adsorción lineal isoterma que supone una relación lineal entre las concentraciones en la fase móvil e inmóvil para cada uno de los isótopos radiactivos. La modelización matemática del proceso de transporte difusivo se ha realizado mediante la ley de Fick (consúltese Kinzelbach<sup>10</sup>) mientras que en la dispersión hidrodinámica se ha considerado el modelo propuesto por Bear, Batchman y Fried que puede encontrarse en Bear<sup>5</sup>, Únicamente se contempla la existencia de reacciones químicas de primer orden.

Las condiciones de contorno consideradas en los límites del dominio físico en el que se produce el transporte de materia son las siguientes:

- 1) Una condición tipo **Dirichlet** en  $x = 0$  mediante la cual se conoce el valor de  $u_i$  en dicho punto y en cualquier instante de tiempo que será igual a la cantidad de cada radionúclido liberada del almacenamiento y disuelta en agua.
- 2) Una condición tipo **Neumann** homogénea en  $x = L$  que sirve para prescribir el flujo difusivo-dispersivo escogiendo un valor  $x = L$  lo suficientemente grande para que el transporte de materia a través de dicho punto pueda considerarse como nulo. Tal condición puede expresarse de esta forma:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = 0 \quad \forall t \in [0, T]$$

y puede ser aproximada por una condición de tipo Dirichlet homogénea que indique la nulidad de la solución en  $x = L$ , en cualquier instante de tiempo.

Puesto que el origen de coordenadas es el punto en el cual empieza el transporte de materia, como condición inicial se tomarán valores nulos para la concentración de cada isótopo en el dominio de trabajo abierto  $]0, L[$  y en el instante de tiempo  $t = 0$ . Por otra parte se supone elegido el eje de coordenadas de modo que tome valores positivos en el sentido de la corriente de agua.

## ESQUEMA NUMÉRICO DE RESOLUCIÓN

Para la discretización espacial se divide el dominio espacial en  $(NX + 1)$  intervalos, también denominados celdas o volúmenes de control que denotamos por  $E_i$  con:

$$E_0 = [0, x_{\frac{1}{2}}] \quad E_i = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \quad i = 1, \dots, NX - 1 \quad E_{NX} = [x_{NX-\frac{1}{2}}, L]$$

de longitud  $H_i \forall i = 0, \dots, NX$ . También se consideran:

$$x_i = \frac{x_{i+\frac{1}{2}} + x_{i-\frac{1}{2}}}{2} \quad i = 1, \dots, NX - 1$$

puntos que constituirán junto con  $x_0 = 0$  y  $x_{NX} = L$  los denominados *nodos del mallado*, valores espaciales sobre los cuales se obtendrán las soluciones numéricas. Por último se define  $h_i$  como la distancia entre los nodos  $x_{i-1}$  y  $x_i \forall i = 1, \dots, NX$ . Diremos que el mallado es **uniforme o regular** si la longitud de todas las celdas interiores

$E_i \forall i = 1, \dots, NX - 1$  es la misma e igual al doble de la que poseen las dos celdas frontera  $E_0$  y  $E_{NX}$ .

El método de volúmenes finitos en síntesis consiste en integrar cada ecuación diferencial del sistema (1) en cada celda del mallado, y aproximar cada una de las integrales resultantes. Las aproximaciones para los términos derivados de los fenómenos físicos de convección y difusión-dispersión, son elegidas de forma que el esquema sea conservativo. De este modo se obliga a que se verifique la siguiente relación:

$$L_{i+\frac{1}{2}}^{i+1} = -L_{i+\frac{1}{2}}^i$$

donde  $L_{i+\frac{1}{2}}^i$  es la aproximación del flujo en el punto  $x_{i+\frac{1}{2}}$  en la celda  $E_i$  y  $L_{i+\frac{1}{2}}^{i+1}$  es la aproximación del flujo en la celda  $E_{i+1}$  en el mismo punto  $x_{i+\frac{1}{2}}$ . Con ello la aproximación integral mantendrá las propiedades de los flujos, origen del sistema de ecuaciones en derivadas parciales.

La discretización temporal se realiza mediante un  $\theta$ -esquema que en líneas generales se resume en subdividir el intervalo  $[0, T]$  en  $NT$  intervalos  $[t^n, t^{n+1}]$  con  $t^0 = 0$  y  $t^{NT} = T$ , aproximando una ecuación  $\frac{\partial g1(t)}{\partial t} = g2(t)$ , por un esquema de este tipo:

$$\frac{g1(t^{n+1}) - g1(t^n)}{\Delta t_n} = \theta g2(t^{n+1}) + (1 - \theta)g2(t^n)$$

$$\forall n \in [0, NT - 1]$$

donde  $\Delta t_n = t^{n+1} - t^n$  y  $\theta \in [0, 1]$ .

Denotando por  $x_{-\frac{1}{2}} = 0$  y  $x_{NX+\frac{1}{2}} = L$ , la integración de cada ecuación del sistema (1) en cada una de las celdas  $E_i$  conduce, después de aplicar un  $\theta$ -esquema e integrar por partes, a estas ecuaciones:

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} a_l^{n+1}(x)u_l^{n+1}(x)dx + \theta \Delta t_n \Pi_{l,i}^{n+1} =$$

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} a_l^n(x)u_l^n(x)dx - (1 - \theta) \Delta t_n \Pi_{l,i}^n \quad (2)$$

$$l = 1, \dots, NE \quad i = 0, \dots, NX \quad n = 0, \dots, NT - 1$$

donde:

$$\Pi_{l,i}^n = - \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f_l(x, t^n) dx + v^n(x_{i+\frac{1}{2}})u_l^n(x_{i+\frac{1}{2}}) - v^n(x_{i-\frac{1}{2}})u_l^n(x_{i-\frac{1}{2}})$$

$$- k^n(x_{i+\frac{1}{2}}) \frac{\partial u_l^n(x_{i+\frac{1}{2}})}{\partial x} + k^n(x_{i-\frac{1}{2}}) \frac{\partial u_l^n(x_{i-\frac{1}{2}})}{\partial x}$$

$$+ \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} q_l^n(x)u_l^n(x)dx - \sum_{k \neq l} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Gamma^{k \rightarrow l}(x, t^n)u_k^n(x) dx$$

utilizando los superíndices "n" para denotar el valor de las funciones en  $t^n$ .

Para expresar el sistema de ecuaciones (2) anterior en función de las incógnitas " $u_l^n(x_i)$ " y " $u_l^{n+1}(x_i)$ "  $\forall i = 0, \dots, NX$  que representan el valor de la solución en cada uno de los nodos se realiza una aproximación de las integrales en cada intervalo  $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \forall i = 0, \dots, NX$ , así como aproximaciones de los términos convectivo y difusivo:

$$\begin{aligned} & "v^{n+1}(x_{i+\frac{1}{2}})u_l^{n+1}(x_{i+\frac{1}{2}}) - v^{n+1}(x_{i-\frac{1}{2}})u_l^{n+1}(x_{i-\frac{1}{2}})" \\ & " - k^{n+1}(x_{i+\frac{1}{2}}) \frac{\partial u_l^{n+1}(x_{i+\frac{1}{2}})}{\partial x} + k^{n+1}(x_{i-\frac{1}{2}}) \frac{\partial u_l^{n+1}(x_{i-\frac{1}{2}})}{\partial x} " \end{aligned}$$

Generalmente el método de volúmenes finitos trabaja bajo la suposición de la existencia de una concentración cercana a una constante en el interior de cada una de las celdas. Con esta hipótesis de trabajo la aproximación integral elegida se basa en la regla del punto medio. Sin embargo las soluciones numéricas obtenidas con este tipo de aproximación integral suelen presentar una elevada difusión numérica, en problemas en los que el fenómeno convectivo domina claramente sobre el difusivo, hecho que las hace inaceptables, según se ve en Balaguer et al.<sup>3</sup>.

Por este motivo supondremos que la variación de la solución es lineal. La aproximación integral que en lo que sigue se va a utilizar es pues la siguiente:

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u^n(x) dx & \approx \left( u^n(x_{i-1}) + \frac{H_{i-1}}{2 \cdot h_i} (u^n(x_i) - u^n(x_{i-1})) \right) \frac{H_i}{2} \\ & + \left( u^n(x_i) + \frac{H_i}{2 \cdot h_{i+1}} (u^n(x_{i+1}) - u^n(x_i)) \right) \frac{H_i}{2} = \left[ \left( 1 - \frac{H_{i-1}}{2 \cdot h_i} \right) u^n(x_{i-1}) \right. \\ & \left. + \left( \frac{H_{i-1}}{2 \cdot h_i} + \left( 1 - \frac{H_i}{2 \cdot h_{i+1}} \right) \right) u^n(x_i) + \frac{H_i}{2 \cdot h_{i+1}} u^n(x_{i+1}) \right] \frac{H_i}{2} \\ & i = 2, \dots, NX - 1 \\ \int_{x_{\frac{1}{2}}}^{x_{\frac{3}{2}}} u^n(x) dx & \approx \left[ \left( 1 - \frac{H_0}{h_1} \right) u^n(x_0) + \left( \frac{H_0}{h_1} + \left( 1 - \frac{H_1}{2 \cdot h_2} \right) \right) u^n(x_1) + \frac{H_1}{2 \cdot h_2} u^n(x_2) \right] \frac{H_1}{2} \\ \int_{x_{NX-\frac{1}{2}}}^{x_{NX}} u^n(x) dx & \approx \frac{H_{NX}}{2} \left[ \frac{H_{NX-1} + H_{NX}}{h_{NX}} u^n(x_{NX}) + \frac{H_{NX}}{h_{NX}} u^n(x_{NX-1}) \right] \end{aligned}$$

Se puede observar la omisión de la integración en " $E_0$ ". Ello se debe a la existencia de una condición de contorno de tipo Dirichlet en " $x = 0$ ", que permite la sustitución de las  $NE$  ecuaciones resultantes de la integración en dicha celda, por las igualdades:

$$u_l^{n+1}(x_0) = u_{l,0}(t^{n+1}) \quad l = 1, \dots, NE$$

siendo  $u_{l,0}(t)$  una función conocida en  $t^n \forall n \forall l = 1, \dots, NE$ .

Lo mismo ocurrirá con la integración en  $E_{NX}$  bajo la suposición de una condición de contorno de tipo Dirichlet en  $x = L$  que sustituya a la actual condición de tipo Neumann homogénea.

En el caso de considerar un mallado regular de longitud igual a  $H$ , las expresiones anteriores adoptan esta forma más sencilla:

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u^n(x) dx \approx \frac{H}{4} (u^n(x_{i-1}) + 2u^n(x_i) + u^n(x_{i+1})) \quad (3)$$

$$i = 1, \dots, NX - 1$$

$$\int_{x_{NX-\frac{1}{2}}}^{x_{NX}} u^n(x) dx \approx \frac{H}{8} (3u^n(x_{NX}) + u^n(x_{NX-1})) \quad (4)$$

Como aproximación al término convectivo se ha considerado la siguiente:

$$v^n(x_{i+\frac{1}{2}})u^n(x_{i+\frac{1}{2}}) \approx v^n(x_{i+\frac{1}{2}}) \left( \frac{H_{i+1}}{2 \cdot h_{i+1}} u^n(x_i) + \frac{H_i}{2 \cdot h_{i+1}} u^n(x_{i+1}) \right)$$

$$i = 1, \dots, NX - 2$$

$$v^n(x_{\frac{1}{2}})u^n(x_{\frac{1}{2}}) \approx v^n(x_{\frac{1}{2}}) \left( \frac{H_1}{2 \cdot h_1} u^n(x_0) + \frac{H_0}{h_1} u^n(x_1) \right)$$

$$v^n(x_{NX-\frac{1}{2}})u^n(x_{NX-\frac{1}{2}}) \approx v^n(x_{NX-\frac{1}{2}}) \left( \frac{H_{NX}}{h_{NX}} u^n(x_{NX-1}) + \frac{H_{NX-1}}{2 \cdot h_{NX}} u^n(x_{NX}) \right)$$

mediante la cual y en el caso de tomar un mallado regular, se obtiene el siguiente resultado para cada celda:

$$v^n(x_{i+\frac{1}{2}})u^n(x_{i+\frac{1}{2}}) - v^n(x_{i-\frac{1}{2}})u^n(x_{i-\frac{1}{2}}) \approx \frac{1}{2} \left( v^n(x_{i+\frac{1}{2}})u^n(x_{i+1}) + \left( v^n(x_{i+\frac{1}{2}}) - v^n(x_{i-\frac{1}{2}}) \right) u^n(x_i) - v^n(x_{i-\frac{1}{2}})u^n(x_{i-1}) \right)$$

$$i = 1, \dots, NX - 1$$

$$v^n(x_{NX})u^n(x_{NX}) - v^n(x_{NX-\frac{1}{2}})u^n(x_{NX-\frac{1}{2}}) \approx -\frac{1}{2} v^n(x_{NX-\frac{1}{2}})u^n(x_{NX-1}) + \left[ v^n(x_{NX}) - \frac{1}{2} v^n(x_{NX-\frac{1}{2}}) \right] u^n(x_{NX})$$

Existen otro tipo de aproximaciones para el término convectivo que presentan un buen comportamiento (sin oscilaciones numéricas) en su utilización conjunta con la fórmula de integración del punto medio, como ocurre por ejemplo con la siguiente, según se razona en Balaguer<sup>1</sup>:

$$v^n(x_{i+\frac{1}{2}})u^n(x_{i+\frac{1}{2}}) - v^n(x_{i-\frac{1}{2}})u^n(x_{i-\frac{1}{2}}) \approx v^n(x_{i+\frac{1}{2}})u^n(x_i) - v^n(x_{i-\frac{1}{2}})u^n(x_{i-1}) \quad (5)$$

Sin embargo su aplicación conjunta con la fórmula de integración del trapecio produce soluciones numéricas con una difusión numérica inaceptable según veremos posteriormente en algún ejemplo.

Para la aproximación al término difusivo, se ha elegido el siguiente esquema en diferencias:

$$k^n(x_{i+\frac{1}{2}}) \frac{\partial u^n(x_{i+\frac{1}{2}})}{\partial x} \approx k^n(x_{i+\frac{1}{2}}) \frac{u^n(x_{i+1}) - u^n(x_i)}{h_{i+1}}$$

que presenta un buen comportamiento en la resolución del problema:

$$-u''(x) = f(x) \quad x \in ]0, 1[, \quad u(0) = 0, \quad u(1) = 0$$

según se comprueba en Gallouet<sup>8</sup>.

En la celda  $E_{NX}$ , en la que se ha impuesto la condición de contorno de tipo Neumann homogénea la expresión a considerar será:

$$-k^n(x_{NX}) \frac{\partial u^n(x_{NX})}{\partial x} + k^n(x_{NX-\frac{1}{2}}) \frac{\partial u^n(x_{NX-\frac{1}{2}})}{\partial x} \approx k^n(x_{NX-\frac{1}{2}}) \frac{u^n(x_{NX}) - u^n(x_{NX-1})}{h_{NX}}$$

Otra alternativa a lo que se acaba de describir puede ser la sustitución de la fórmula de integración por una fórmula de cuadratura que utilice una regla de trapecio compuesta. Tal aproximación puede por ejemplo estar basada en la división de cada celda del mallado en dos intervalos de integración  $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_i]$  y  $[x_i, x_{i+\frac{1}{2}}]$  e interpolando linealmente el valor de la función  $u^n$  en cada uno de los extremos de la celda:

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} u^n(x) dx &\approx \frac{[u^n(x_{i-1}) + \frac{H_{i-1}}{2 \cdot h_i} (u^n(x_i) - u^n(x_{i-1}))] + u^n(x_i) \frac{H_i}{2}}{2} \\ \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u^n(x) dx &\approx \frac{[u^n(x_i) + \frac{H_i}{2 \cdot h_{i+1}} (u^n(x_{i+1}) - u^n(x_i))] + u^n(x_i) \frac{H_i}{2}}{2} \\ &i = 2, \dots, NX - 1 \\ \int_{x_{\frac{1}{2}}}^{x_1} u^n(x) dx &\approx \frac{[u^n(x_0) + \frac{H_0}{h_1} (u^n(x_1) - u^n(x_0))] + u^n(x_1) \frac{H_1}{2}}{2} \\ \int_{x_1}^{x_{\frac{3}{2}}} u^n(x) dx &\approx \frac{[u^n(x_1) + \frac{H_1}{2 \cdot h_2} (u^n(x_2) - u^n(x_1))] + u^n(x_1) \frac{H_1}{2}}{2} \\ \int_{x_{NX-\frac{1}{2}}}^{x_{NX}} u^n(x) dx &\approx \frac{H_{NX}}{2} \left[ \frac{H_{NX-1} + H_{NX}}{h_{NX}} u^n(x_{NX}) + \frac{H_{NX}}{h_{NX}} u^n(x_{NX-1}) \right] \end{aligned}$$

considerando:

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u^n dx = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_i} u^n dx + \int_{x_i}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u^n dx$$

En el caso de un mallado uniforme esta aproximación se expresa de esta forma:

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u^n(x) dx \approx \frac{H}{8} [u^n(x_{i-1}) + 6u^n(x_i) + u^n(x_{i+1})] \quad (6)$$

$$i = 1, \dots, NX - 1$$

$$\int_{x_{NX-\frac{1}{2}}}^{x_{NX}} u^n(x) dx \approx \frac{H}{8} [3u^n(x_{NX}) + u^n(x_{NX-1})] \quad (7)$$

Sin embargo, contrariamente a lo que intuitivamente se pueda pensar, el uso de este tipo de aproximación integral requiere la utilización de un mayor número de celdas e intervalos temporales en la obtención de soluciones numéricas sin oscilaciones y con poca difusión numérica, según se pondrá de manifiesto en algunos

Sustituyendo la aproximación integral y las aproximaciones de los términos convectivo y difusivo en el sistema de ecuaciones (2), obtenemos un sistema lineal:

$$\begin{aligned} A^{n+1} U^{n+1} &= f^n + B^n U^n \\ n &= 0, \dots, NT - 1 \end{aligned} \quad (8)$$

donde:

$$\begin{aligned} U^n &= (U_1^n, U_2^n, \dots, U_l^n, \dots, U_{NE}^n)^t \\ U_l^n &= (u_l^n(x_0), u_l^n(x_1), \dots, u_l^n(x_i), \dots, u_l^n(x_{NX}))^t \end{aligned}$$

y cuya resolución nos proporciona el valor de la solución para cada uno de los isótopos de la cadena radiactiva, en cada uno de los nodos, y en el tiempo  $t^{n+1}$ . Los valores de  $A^{n+1}$  y  $B^n$  son conocidos y vienen dados por los coeficientes del sistema de ecuaciones en derivadas parciales. Son matrices compuestas por  $NE$  bloques tridiagonales, cada uno de orden  $(NX + 1) \times (NX + 1)$ . Por su parte  $f^n \in \mathfrak{R}^{NE \cdot (NX+1)}$  y está compuesto por  $NE$  vectores de orden  $NX + 1$ :

$$f^n = (f_1^n, f_2^n, \dots, f_l^n, \dots, f_{NE}^n)^t$$

donde la primera componente de cada  $f_l^n$  será igual a  $u_{l,0}(t^{n+1})$  para obligar a que se verifique la condición de tipo Dirichlet en  $x = 0$ , estando el resto en función de la integración de la función  $f$  en cada una de las celdas:

$$\begin{aligned} f_{l,i}^n &= \theta \Delta t_n \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f_l(x, t^{n+1}) dx + (1 - \theta) \Delta t_n \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f_l(x, t^n) dx \\ i &= 1, \dots, NX - 1 \\ f_{l,NX}^n &= \theta \Delta t_n \int_{x_{NX-\frac{1}{2}}}^{x_{NX}} f_l(x, t^{n+1}) dx + (1 - \theta) \Delta t_n \int_{x_{NX-\frac{1}{2}}}^{x_{NX}} f_l(x, t^n) dx \end{aligned}$$

La resolución de (8) presupone que todos los valores de  $U^n$  son conocidos. Por medio de la condición inicial supuesta conocemos el valor de la solución en  $]0, L[$  cuando  $t = 0$  para cada uno de los isótopos radiactivos presentes que será igual a cero. El valor en  $x = 0$  también es conocido por medio de la condición de contorno de tipo Dirichlet. Debido a la condición de tipo Neumann homogénea en  $x = L$  y al valor nulo de la solución en  $x_{NX-1}$ , supondremos que  $u_l(L, 0) = 0$ . De esta forma  $U^0$  es conocido. La resolución de (8) proporciona  $U^1$  y en general conocido  $U^n$  se obtendrá  $U^{n+1}$ .

## ESTUDIO DEL ERROR DE CONSISTENCIA

Suponiendo que la función  $f$  y la solución exacta de nuestro problema son "suaves" (exceptuando el instante  $t = 0$  en que la condición inicial puede ser discontinua en  $x = 0$  la solución de (1) es suave al tratarse de ecuaciones parabólicas) y desarrollando en serie de Taylor los distintos valores de ambas funciones alrededor de cada punto  $(x_i, t^n)$  se concluye que los dos esquemas obtenidos con cada una de las dos fórmulas de trapecio expuestas en la sección anterior son consistentes de orden "1" en espacio y "1" en tiempo. Sin embargo merece una mención especial el caso con mallado regular, con un incremento temporal y coeficientes  $a_l(x, t)$ ,  $v(x, t)$ ,  $k(x, t)$  y  $q_l(x, t)$  constantes, en el cual la expresión del error de consistencia se reduce a (ver Balaguer<sup>1</sup>):

$$\begin{aligned} e_{l,i}^{TR} &= \frac{\Delta t}{2}(1 - 2\theta)a_l \frac{\partial^2 u_l}{\partial t^2} \Big/ \Big|_i^n + \frac{(\Delta t)^2}{6}(1 - 3\theta)a_l \frac{\partial^3 u_l}{\partial t^3} \Big/ \Big|_i^n \\ &+ \frac{H^2}{4} \left[ -\frac{1}{3}v \frac{\partial^3 u_l}{\partial x^3} \Big/ \Big|_i^n + \frac{2}{3}k \frac{\partial^4 u_l}{\partial x^4} \Big/ \Big|_i^n \right] \\ &+ o(H^2 \cdot \Delta t) + o(H^2 \cdot (\Delta t)^2) + o(H^3, (\Delta t)^3) \end{aligned}$$

para cada isótopo "l", elegida la fórmula de aproximación integral (3) y (4).

De dicha igualdad se deduce que bajo una supuesta relación lineal entre  $H$  y  $\Delta t$  se aumenta el orden del esquema, que pasa a ser igual a "2" elegido un valor de  $\theta = 0.5$ . Como por otra parte el estudio de la estabilidad del esquema conduce a que este es estable para  $\theta \geq 0.5$ , se tomará como valor óptimo  $\theta = 0.5$ . Es el esquema temporal que habitualmente se denomina de Crank Nicolson (C.N.). El esquema numérico que utilizaremos en la resolución de los ejemplos es por tanto un C.N. trapecoidal esquema de volúmenes finitos y se ha implementado en un código denominado TRAVOL5.

En la anterior expresión de  $e_{l,i}^{TR}$  destaca la aparición de  $\frac{\partial^3 u_l}{\partial x^3} \Big/ \Big|_i^n$  que explica la existencia de oscilaciones en la solución numérica obtenida, que se hacen menos significativas al disminuir el valor de  $H$ . Sin embargo el fenómeno de las oscilaciones guarda una gran relación con la estabilidad, hecho que explica la aparición de mayores oscilaciones en el esquema que utiliza la fórmula de trapecio compuesta (6) y (7) con  $\theta = 0.5$  (esquema implementado en el código TRACVOL5) a pesar de tener una

expresión del error de truncamiento parecida a la del esquema anterior:

$$\begin{aligned} e_{l,i}^{TRC} &= \frac{\Delta t}{2}(1-2\theta)a_l \frac{\partial^2 u_l}{\partial t^2} /_i^n + \frac{(\Delta t)^2}{6}(1-3\theta)a_l \frac{\partial^3 u_l}{\partial t^3} /_i^n \\ &+ \frac{H^2}{8} \left[ \frac{1}{3}v \frac{\partial^3 u_l}{\partial x^3} /_i^n + \frac{1}{3}k \frac{\partial^4 u_l}{\partial x^4} /_i^n \right] \\ &+ o(H^2 \cdot \Delta t) + o(H^2 \cdot (\Delta t)^2) + o(H^3, (\Delta t)^3) \end{aligned}$$

Si parece ser resaltable la disminución en el coeficiente que multiplica al término:  $\frac{\partial^4 u_l}{\partial x^4}$  en  $e_{l,i}^{TRC}$ , 4 veces menor que en  $e_{l,i}^{TR}$  y causante por tanto de una menor difusión numérica en la solución. De este modo, al ser menor la difusión numérica, cobra una mayor importancia la presencia de falsas oscilaciones.

## EJEMPLOS

A continuación se presentan una serie de ejemplos con la finalidad de reflejar el comportamiento de las soluciones numéricas obtenidas con el código TRAVOL5 y probar su eficacia efectuando una comparación con la solución analítica, en los casos en que ello sea posible, o con la solución obtenida con el código COLUMN2. En todos los ejemplos se utilizará un mallado regular de paso  $H$  con una discretización temporal de longitud  $\Delta t$ . Además se elegirá  $V \cdot \Delta t \leq a_l \cdot H$  para evitar la presencia de falsas oscilaciones en las soluciones de TRAVOL5, y una pérdida de precisión en COLUMN2. Las funciones  $v$ ,  $k$ ,  $a_l$  y  $f$  se suponen constantes con estos valores:

$$v = 1 \text{ m./año}, \quad k = 0.03\text{m}^2/\text{año}, \quad a_l = 1 \forall l, \quad f = 0$$

### Ejemplo 1

Se modeliza el transporte de un único isótopo radiactivo que no se desintegra radiactivamente y cuya concentración en " $x = 0$ " toma un valor igual a "1" en cualquier valor de tiempo. Su evolución espacial y temporal se rige por tanto por la ecuación de convección-difusión con las especificadas condiciones inicial y contorno:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} - 0.03 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \\ u(x, 0) = 0 \quad \forall x \in ]0, L[ \\ u(0, t) = 1 \quad \forall t \in [0, T] \\ \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = 0 \quad \forall t \in [0, T] \end{cases}$$

En la Figura 1A se muestra una comparación entre las soluciones de COLUMN2 y TRAVOL5 con valores  $H = \Delta t = \frac{1}{4}$  y en ella se aprecia la semejanza entre ambas. La variación unilateral de  $\Delta t$  manteniendo fijo el valor de  $H$  no mejora la precisión de ambos códigos (ver Figura 1B). En Ogata & Banks<sup>11</sup> se puede encontrar la solución analítica de este ejemplo eligiendo  $L = \infty$  y suponiendo que  $u(\infty, t) = 0 \forall t \in [0, T]$ . Comparando dicha solución con la numérica obtenida con TRAVOL5 considerando una condición de tipo Dirichlet homogénea en  $x = 100$  ( $u(100, t) = 0 \forall t \in [0, T]$ ) se observa un ligero adelanto de esta última (Figura 1C), que va disminuyendo a medida que el valor de  $H = \Delta t$  es más pequeño.

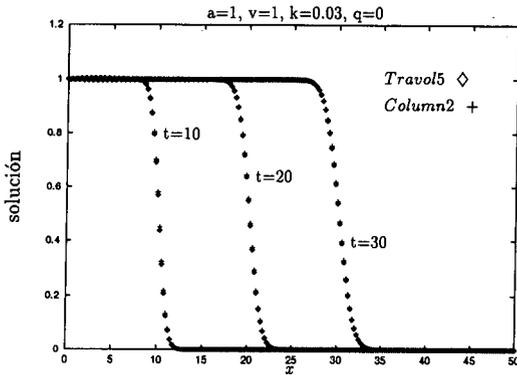


Figura 1A.  $H = \Delta t = \frac{1}{4}$

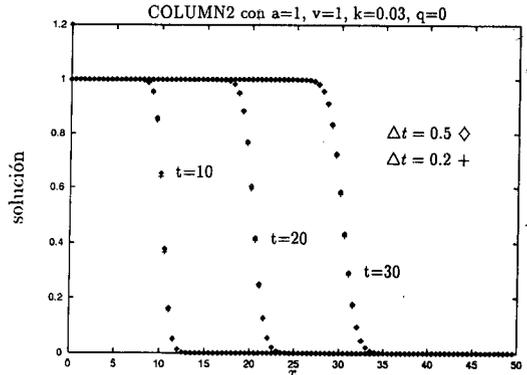


Figura 1B.  $H = \frac{1}{2}$

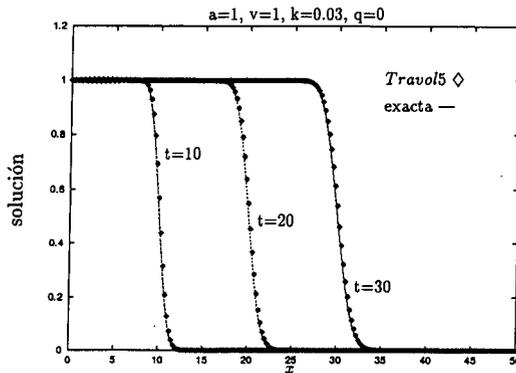


Figura 1C.  $H = \Delta t = \frac{1}{4}$

La utilización de TRACVOL5 con los mismos valores  $H = \Delta t = 0.25$  produce una solución numérica con ligeras oscilaciones (Figura 1D) que se hacen más significativas al aumentar el valor de  $H$  según se refleja la Figura 1E. Por su parte el uso de la fórmula de aproximación (5) para el término convectivo produce soluciones con una inaceptable difusión numérica, incluso para valores de  $k$  más cercanos a  $v$  (ver Figura 1F).

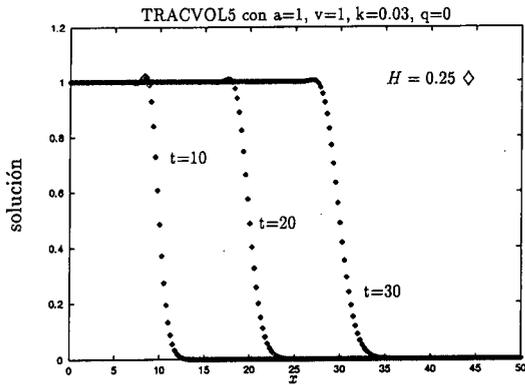


Figura 1D.  $\Delta t = \frac{1}{4}$

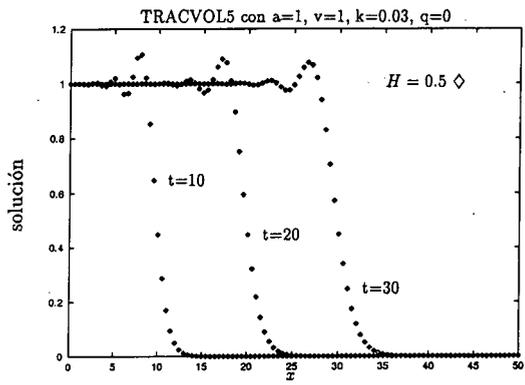


Figura 1E.  $\Delta t = \frac{1}{4}$

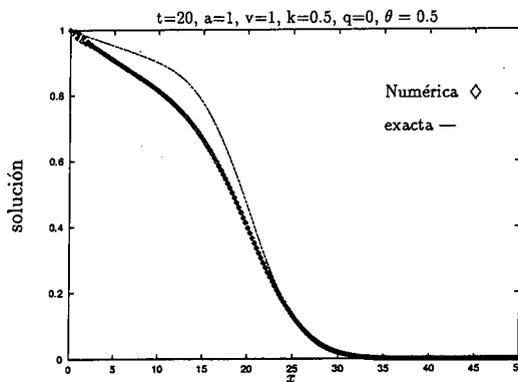


Figura 1F.  $H = \Delta t = \frac{1}{4}$

### Ejemplo 2

Se mantienen las mismas condiciones del ejemplo anterior a excepción de la condición de tipo Dirichlet en  $x = 0$  que ahora no es constante:

$$\left. \begin{aligned} u(0, t) &= 1 \forall t \leq 5 \\ u(0, t) &= 0 \forall t > 5 \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Con esta nueva condición la solución de este problema varía bastante respecto a la del caso anterior, pasando ahora a tener la forma de una campana de Gauss que se desplaza a lo largo del tiempo en base a la velocidad de convección, a la vez que disminuye en altura y aumenta en amplitud debido a la existencia del fenómeno de difusión y dispersión.

En este caso existe una mayor diferencia entre las soluciones numéricas obtenidas al decrecer el valor de  $H$  (ver Figura 2A) aunque con TRAVOL5 no es necesaria una disminución tan importante en el valor  $H$  como en COLUMN2 para obtener la misma precisión. En la Figura 2B se aprecia la semejanza entre el resultado obtenido con ambos esquemas pero hay que tener en cuenta que la solución de TRAVOL5 ha sido obtenida con  $H = \Delta t = \frac{1}{2}$  mientras que en la solución de COLUMN2 se ha elegido  $H = \Delta t = \frac{1}{4}$ . Y lo mismo ocurre incluso con valores de  $H$  mayores según vemos en la Figura 2C en la que se ha utilizado en TRAVOL5  $H = \Delta t = 1$  y en COLUMN2  $H = \Delta t = \frac{1}{2}$ .

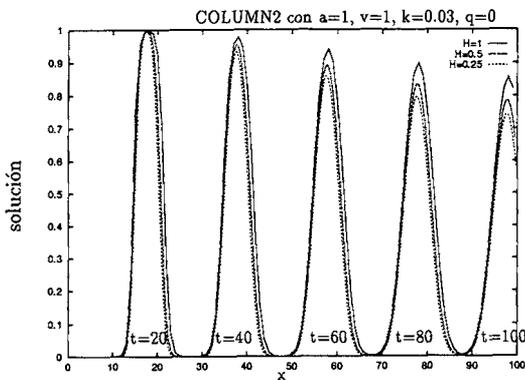


Figura 2A.

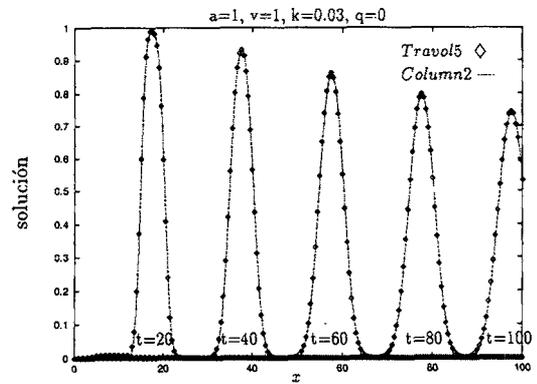


Figura 2B.

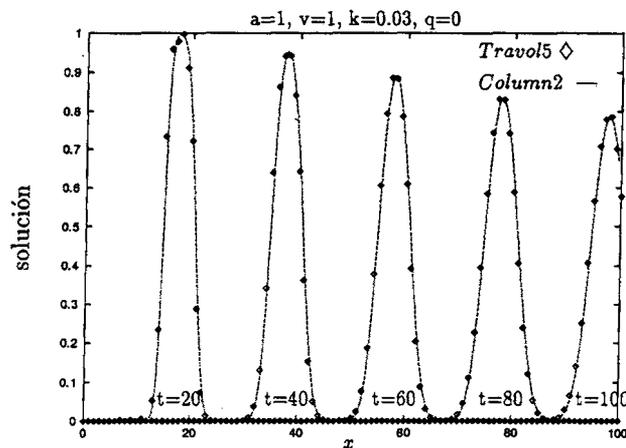


Figura 2C.

**Ejemplo 3**

En este ejemplo se ha mantenido la condición de tipo Dirichlet (9) utilizada en el caso anterior y como innovación se considera la presencia de dos isótopos radiactivos, el primero de los cuales se desintegra para formar por filiación el segundo (con  $\lambda_1 = 0.01$ ) que permanece estable sin desintegrarse en ningún otro (es decir  $\lambda_2 = 0$ ).

La concentración espacial de cada isótopo varía en función del aporte de materia recibido o liberado, de modo que la concentración total del isótopo "2" aumenta a lo largo del tiempo con el mismo ritmo que disminuye la del isótopo "1". Ello provoca una variación en el área de la superficie encerrada debajo de las gráficas a diferencia del ejemplo anterior en que ésta permanece constante al simular, únicamente, en aquel caso, fenómenos conservativos.

Las soluciones numéricas obtenidas van variando de un modo similar al caso anterior para cada uno de los isótopos, a medida que el valor de  $H$  decrece según, se ve en las Figuras 3A y 3B. Nos quedamos con un valor de  $H = 0.2$  y  $\Delta t = 0.1$  pues valores menores de  $H$  producen soluciones muy parecidas a la obtenida y una disminución unilateral de  $\Delta t$  ya no logra mejorarla.

De nuevo el comportamiento de los dos códigos TRAVOL5 y COLUMN2 es muy similar (Figuras 3C y 3D).

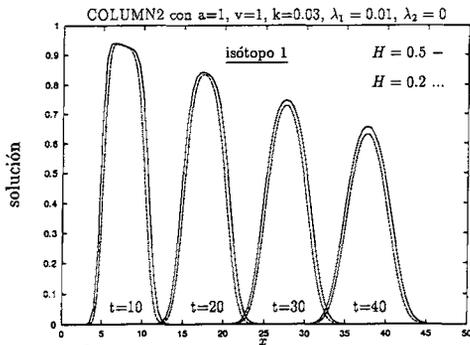


Figura 3A.  $H = \Delta t$

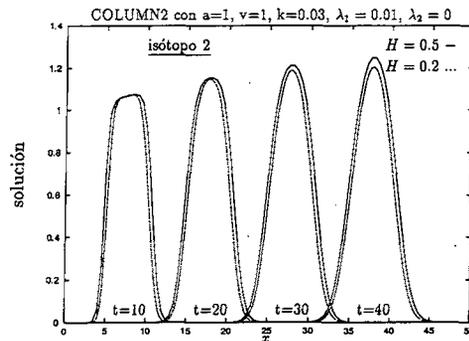


Figura 3B.  $H = \Delta t$

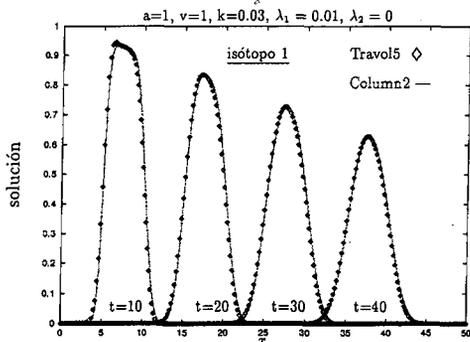


Figura 3C.  $H = 0.2, \Delta t = 0.1$

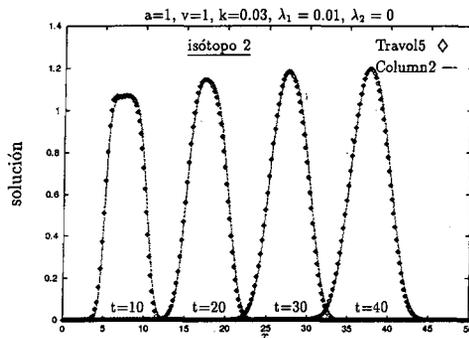


Figura 3D.  $H = 0.2, \Delta t = 0.1$

#### Ejemplo 4

Con las mismas condiciones de contorno del ejemplo anterior se ha simulado el transporte de una cadena radiactiva formada por tres isótopos, el primero de los cuales se desintegra para formar el segundo, el segundo se desintegra para formar el tercero y el tercero reacciona químicamente con el primero por medio de una reacción de primer orden. Las constantes de desintegración y reacciones químicas toman estos valores:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0.02, & r^{1 \rightarrow 2} &= 0, & r^{1 \rightarrow 3} &= 0 \\ r^{2 \rightarrow 1} &= 0, & \lambda_2 &= 0.01, & r^{2 \rightarrow 3} &= 0 \\ r^{3 \rightarrow 1} &= 0.03, & r^{3 \rightarrow 2} &= 0, & \lambda_3 &= 0 \end{aligned}$$

Las soluciones obtenidas con TRAVOL5 y COLUMN2 son muy parecidas elegido un valor de  $H$  lo suficientemente pequeño según se aprecia en la Figura 4A.

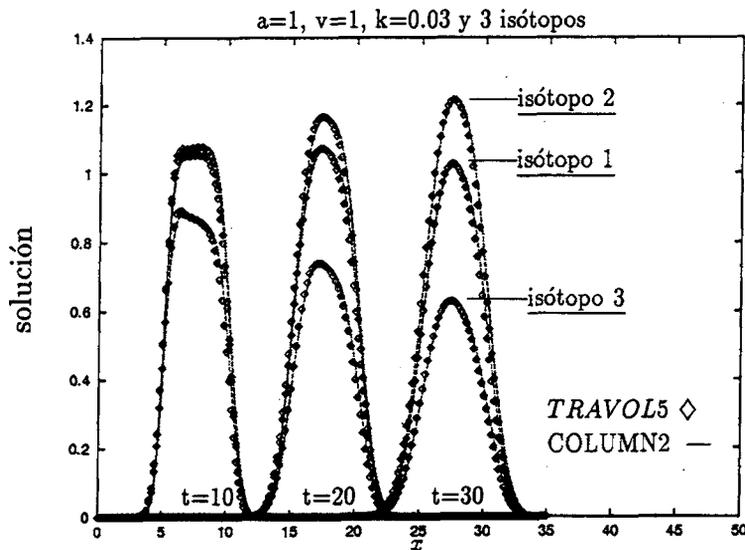


Figura 4A.  $H = 0.2$ ,  $\Delta t = 0.1$

La concentración total a lo largo de todo el dominio espacial del isótopo "2" va aumentando a lo largo del tiempo puesto que, aunque dicho isótopo pierde materia por desintegración, nuevas cantidades de dicho isótopo se van creando por filiación, proporcionalmente a la concentración existente del isótopo "1" siendo  $\lambda_1 > \lambda_2$ . Por su parte la cantidad de materia del isótopo "3" que se convierte en isótopo "1" mediante una reacción química de primer orden es, en los primeros instantes de tiempo, superior a la que se genera por filiación a partir del isótopo "2".

**Ejemplo 5**

Se supone que en el tiempo de  $t = 0$  años se rompe el contenedor que contiene las sustancias radiactivas, compuestas por tres isótopos el primero de los cuales se encuentra en dicho instante con una concentración igual a "1", la concentración del segundo es igual a "0.5" y el isótopo "3" es un elemento nuevo que todavía no existe hasta dicho momento, pero que se va formando por filiación del isótopo "2" a partir de dicho instante de tiempo. Las constantes de desintegración son:

$$\lambda_1 = 0.015, \quad \lambda_2 = 0.01, \quad \lambda_3 = 0$$

No se considera la existencia de reacciones químicas entre los isótopos.

La concentración de cada isótopo que permanece en el interior del contenedor a lo largo del tiempo vendrá ahora dada por la resolución del siguiente sistema de ecuaciones ordinarias  $\forall t \in [0, 30]$  (se ha supuesto que en el tiempo  $t = 30$  años ya no queda ningún tipo de sustancias radiactivas en el interior del contenedor):

$$\begin{aligned} \frac{dw_1}{dt}(t) &= -\left(0.015 + \frac{3}{30-t}\right)w_1(t) \\ \frac{dw_2}{dt}(t) &= 0.015w_1(t) - \left(0.01 + \frac{3}{30-t}\right)w_2(t) \\ \frac{dw_3}{dt}(t) &= 0.01w_2(t) - \frac{3}{30-t}w_3(t) \end{aligned}$$

con la condición inicial ya señalada:

$$w_1(0) = 1, \quad w_2(0) = 0.5, \quad w_3(0) = 0$$

y cuya única solución es la siguiente:

$$\begin{aligned} w_1(t) &= \left(\frac{30-t}{30}\right)^3 \exp(-0.015.t) \\ w_2(t) &= \left(\frac{30-t}{30}\right)^3 \{-3\exp(-0.015.t) + 3.5\exp(-0.01.t)\} \\ w_3(t) &= \left(\frac{30-t}{30}\right)^3 \{2\exp(-0.015.t) - 3.5\exp(-0.01.t) + 1.5\} \end{aligned}$$

En el anterior sistema de ecuaciones se ha supuesto que la matriz vítrea que forman las sustancias radiactivas en el interior del contenedor tiene forma esférica y todos los radionúclidos se hallan homogéneamente dispersos en ella. Bajo dicha hipótesis y considerando que toda las sustancias que pierde el contenedor pasan a ser transportadas

por el agua, tenemos la siguiente condición de contorno en  $x = 0$  para el modelo de transporte:

$$u_i^n(x_0) = \frac{3w_i(t^n)}{30 - t^n} \quad \forall i = 1, 2, 3$$

La solución numérica obtenida con el código TRAVOL5 puede verse en las Figuras 5A, 5B y 5C. A diferencia de casos anteriores, la concentración de cada isótopo en  $x = 0$  es una función continua que varía con el tiempo (ver Figura 5D).

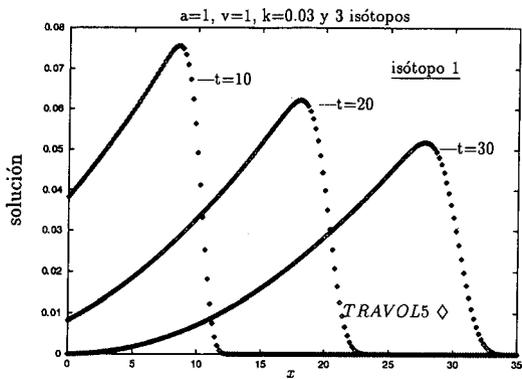


Figura 5A.  $H = 0.2, \Delta t = 0.1$

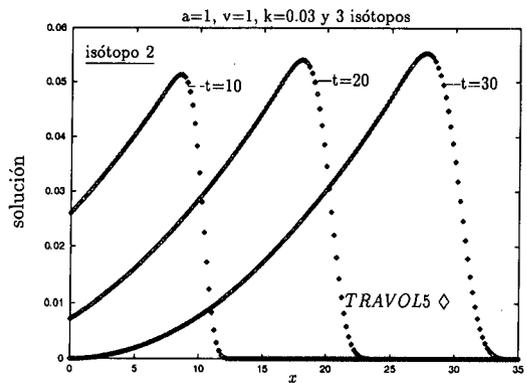


Figura 5B.  $H = 0.2, \Delta t = 0.1$

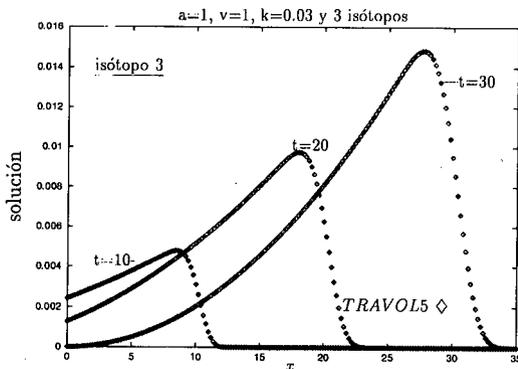


Figura 5C.  $H = 0.2, \Delta t = 0.1$

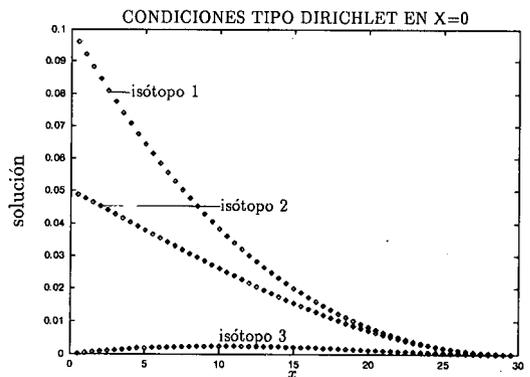


Figura 5D.

## CONCLUSIONES

Un nuevo código (TRAVOL5) basado en el esquema de Crank Nicolson y el método de volúmenes finitos con integración por la regla del trapecio, ha sido implementado para simular el transporte unidimensional de sustancias radiactivas en la geosfera. Se ha efectuado un estudio de su comportamiento en ejemplos con distintos valores en la condición de contorno y diferentes constantes de desintegración y reacciones químicas de primer orden, en casos en los que el término convectivo domina sobre el difusivo-dispersivo. Los resultados se han comparado con las soluciones de un código basado en una combinación de un método de características con diferencias finitas (COLUMN2), y con la solución analítica en los casos en que ello ha sido posible que nos permiten conocer el semejante comportamiento que presentan ambos códigos así como su eficiencia en la resolución de distintos problemas test.

TRAVOL5 y COLUMN2 proporcionan soluciones que viajan con un ligero adelanto respecto a la verdadera solución exacta y no reflejan correctamente la difusión. La disminución de dicho error no puede lograrse con una disminución unilateral del incremento de tiempo utilizado aunque sí con una disminución conjunta de  $H$  y  $\Delta t$ . En algunos casos TRAVOL5 obtiene la misma solución que COLUMN2 pero con valores de  $H$  y  $\Delta t$  mayores. En general la solución obtenida con ambos algoritmos y con el mismo  $H$  e  $\Delta t$ , es prácticamente la misma.

En TRAVOL5 no es posible la utilización de  $V \cdot \Delta t > a_l \cdot H$  pues con ello se hace más significativa la presencia de falsas oscilaciones. COLUMN2 sí puede considerar dichos valores de  $\Delta t$  (si  $H$  es pequeño puede tomar hasta valores de  $V \cdot \Delta t > 4a_l \cdot H$ ) aunque con ello las soluciones obtenidas presentan una mayor difusión numérica.

La ventaja que presenta TRAVOL5 respecto a COLUMN2 es el poder considerar velocidades variables respecto al espacio y al tiempo y una mayor variedad en las condiciones de contorno. Además es posible elegir un paso espacial variable, muy importante a la hora de simular en largos intervalos espaciales y temporales. TRAVOL5 puede ser fácilmente acoplado con modelos de término fuente que proporcionan la concentración de cada contaminante radiactivo disuelta en el agua y sobre todo, utiliza un método más fácil de generalizar a la resolución del caso multidimensional en tanto que no utiliza un mallado que se va moviendo a lo largo de las curvas características.

## AGRADECIMIENTOS

Ángel Balaguer Beser agradece a la Consellería de Cultura, Educació y Ciencia de la Generalitat Valenciana la concesión de una beca FPI, en cuyo período de disfrute se ha realizado el presente trabajo.

Carlos Conde Lázaro agradece a ENRESA el apoyo recibido a través del contrato núm. 0700442, dentro del cual se enmarca su participación en este trabajo.

Este trabajo ha sido parcialmente subvencionado por el proyecto A40MA de Fundació Caixa Castelló.

## REFERENCIAS

1. A. Balaguer, "Resolución numérica del problema unidimensional de transporte en la geosfera de residuos radiactivos mediante un método de volúmenes finitos y mediante un método de Random Walk", *Tesis de Licenciatura*, Universitat Jaume I, Departament de Matemàtiques, Castellón, España, (1993).
2. A. Balaguer, C. Conde, J.A. López, V. Martínez, "Método de volúmenes finitos aplicado al transporte unidimensional de residuos radiactivos en la geosfera", *Actas XIII C.E.D.Y.A., III Congreso de Matemática Aplicada*, Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España, (1993).
3. A. Balaguer, C. Conde, A. Del Cerro, J.A. López, V. Martínez, "Simulación numérica del problema de transporte unidimensional de sustancias radiactivas con técnicas de volúmenes finitos." en *Modelado de sistemas en oceanografía, climatología y ciencias medio-ambientales: Aspectos matemáticos y numéricos* (A. Valle y C. Parés Eds.), Ed. Imagraf, pp. 167-172, (1994).
4. P. Bo, L. Carlsen, O.J. Nielsen, "Column2, a computer program for simulating migration", Riso National Laboratory, DK-4000 Roskilde, Dinamarca, (1985).
5. J. Bear, "*Hydraulics of groundwater*", Ed. McGraw-Hill, New York, USA, (1979).
6. C. Conde, F.J. Elorza, "Modelización de la geosfera. Problemas cualitativos", Lección 20 del curso sobre residuos radiactivos, CIEMAT, UPM, ENRESA, Madrid, España, (1989).
7. C. Conde, F.J. Elorza, A. Ruiz, J. Alonso, F. Heras, I. Alvarez, U. Kindelan, M.J. De Miguel, "Modelos numéricos relacionados con el almacenamiento de residuos radiactivos", *Publicación técnica Núm 02/91*, Ed. ENRESA, Madrid, España, (1989).
8. T. Gallouet, "An introduction to finite volume methods", (Support de cours), Ed. CEA. EDF, INRIA, Clamart, Francia, (1992).
9. C. Johnson, "*Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*", Ed. Cambridge University Press, (1987).
10. W. Kinzelbach, "*Groundwater Modelling. An introduction with sample programs in basic*", Ed. Elsevier, Oxford, (1989).
11. A. Ogata, R.B. Banks, "A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media", *United States Geological Survey, Professional Paper No. 411-A*, (1961).