

# Extensión de un modelo de difusión de partículas contaminantes en medios acuíferos planos a la superficie esférica

Rosa M. Mendez Parra<sup>1</sup>,

Dumar A. Villa Zapata<sup>2</sup>,

Facultad de Ciencias Básicas, Uniquindio – Armênia, Colombia.

**Resumen.** En el presente trabajo, se realiza una extensión de un modelo de difusión, empleado por el Doctor João F. Meyer, de la Universidad de Campinas (Brasil), sobre el modelamiento de difusión de partículas contaminantes en medios planos, como ríos, lagos y mares costeros. La extensión se hace para encontrar un modelo equivalente, que permita describir, en la superficie bidimensional esférica, la difusión de tales partículas.

**Palabras-clave:** *Ecuación de difusión, coordenadas esféricas, contaminación en medios acuosos, modelaje matemática.*

## 1. Introducción

La difusión es un fenómeno presente en muchos aspectos de la naturaleza. Uno de ellos, es la difusión de partículas contaminantes en un medio acuoso. El presente trabajo, tiene por objeto modificar un modelo de difusión

---

<sup>1</sup>rosamendez@uniquindio.edu.co

<sup>2</sup>dumar@uniquindio.edu.co

de partículas contaminantes, apropiado en un medio líquido y plano (ríos, lagos o mares costeros), para que pueda ser utilizado en superficies esféricas (el océano). Para lograr este fin, se utiliza uno de los sistemas de coordenadas curvilíneas y se plantean en el sistema escogido los elementos requeridos para la extensión del modelo.

## 2. Algunos aspectos sobre la difusión

Existen en la naturaleza algunos procesos físicos, llamados Fenómenos de Transporte, que involucran transferencia de materia, energía o momentum. Ejemplos de estos procesos son la viscosidad, propagación del calor y la difusión de masa.

Los modelos de difusión son planteados con ayuda de herramientas matemáticas que permiten la descripción de los procesos difusivos, estas herramientas son las leyes de conservación y las ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales. Algunos procesos biológicos, descritos a partir del modelo de difusión, son encontrados en Murray (1991); Edelstein-Keshet (1988); Okubo (1980).

Difusión es el proceso por el cual, la materia se propaga de una parte de una región en un sistema, a otra región del mismo (Cranck, 1964). Originalmente, bajo difusión se comprendía al proceso de auto-mezclado de las moléculas de un fluido. Posteriormente esta idea fue replanteada, ya que puede resultar que en el proceso difusivo se encuentren fuerzas del medio\* que ayuden a la difusión de partículas, además de reacciones químicas o físicas del soluto con el solvente.

En síntesis, la difusión tiende a devolver el sistema de estudio, a un estado de equilibrio, esto es, un estado de concentración constante.

La difusión se produce por dos mecanismos básicos: difusión molecular o Browniana y difusión turbulenta. La primera, es aquella en la cual las

---

\*Fuerzas convectivas

partículas suspendidas en un fluido, experimentan un movimiento aleatorio, producido por colisiones entre ellas; este fenómeno se conoce como movimiento browniano. La segunda, es la difusión que incluye procesos inducidos por agentes externos al fluido, los cuales, entregando energía de alguna forma al fluido, lo vuelven homogéneo, esto hace que en la difusión turbulenta las partículas se difundan más rápidamente que en la difusión molecular.

Como no todos los procesos de difusión ocurren a la misma velocidad, se ha definido un número llamado *Coefficiente de difusión*, usualmente denotado por  $D$ , que mide la velocidad de la difusión de una sustancia en otra.

Las leyes que rigen los procesos de difusión de materia o masa son: la *ley de conservación de masa*\*\* y la *ley de Fick*\*\*\*.

La ley de conservación de la materia, afirma que: *la tasa de variación de la concentración de partículas en una región, en un instante dado, es igual a la tasa de entrada de las partículas, menos la tasa de salida de las partículas, en la región considerada.*

La primera ley de Fick establece que en un medio homogéneo e isotrópico, *el flujo de partículas es proporcional a menos el gradiente de concentración de las mismas.*

La primera ley de Fick expresada en términos matemáticos es:

$$J(x; t) = -D \frac{\partial C(x; t)}{\partial x}, \quad (2.1)$$

en donde:

- $J(x; t)$ : es el flujo de partículas, dado en unidades de masa por unidad de área por tiempo.
- $C(x; t)$ : es la concentración de la masa, dado en unidades de masa por volumen.
- $D$ : es el coeficiente de difusión, dado en unidades de área por tiempo.

---

\*\* Enunciada por Lavoiser en el siglo XIX.

\*\*\* Enunciada por Fick en 1855.

La ley de conservación de masa expresada en términos matemáticos es:

$$\frac{\partial C(x; t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x; t)}{\partial x}. \quad (2.2)$$

Al derivar (2.1) con respecto a  $x$  y reemplazando en (2.2), se obtiene:

$$\frac{\partial C(x; t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x; t)}{\partial x^2}. \quad (2.3)$$

Esta ecuación es llamada la *Segunda ley de Fick* o *Ley de Difusión Unidimensional*. Al extender la ecuación(2.3), a un espacio  $n$  – *dimensional*, la fórmula resultante para la difusión es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 C(x; t)}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2 C(x; t)}{\partial x_n^2} \right). \quad (2.4)$$

### 3. Estudio del problema

El modelo cartesiano empleado por Meyer para describir la difusión de partículas contaminantes, en un medio bidimensional Meyer (2000), está dado por:

$$\frac{\partial C(x, y, t)}{\partial t} = D \nabla^2 C - \vec{V}(y) \frac{\partial C}{\partial x} - \sigma C + f(x, y, t), \quad (3.5)$$

$$(x, y) \in \Omega, \Omega \subset \mathbb{R}^2, t \in (0, T],$$

en donde:

- $C$ : es la concentración de partículas;
- $\sigma$ : representa la tasa de degradación o decaimiento de las partículas;
- $\vec{V} = V(x; y; t)$ : es un campo de velocidades;
- $D$ : es la difusividad de las partículas;
- $f(x; y; t)$ : es una fuente (o sumidero según el caso);
- $(x; y) \in \Omega, \Omega \subset \mathbb{R}^2$  y  $t \in (0, T]$

Meyer considera las siguientes hipótesis simplificadoras del modelo:

1. El coeficiente de difusión  $D$  es constante en todas las direcciones.
2. La degradación  $\sigma$  es directamente proporcional a la concentración del contaminante.
3. El campo de velocidades  $\vec{V}$  tiene una componente nula en  $y$ , la otra componente en dirección de  $x$  depende de  $y$ .

La frontera  $\partial\Omega$  de la región está dada por:  $\partial\Omega = \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2$  y las condiciones de frontera para este modelo son:

$$1. C|_{\Gamma_0} = 0 \quad 2. \left. \frac{\partial C}{\partial \eta} \right|_{\Gamma_1} = 0 \quad 3. \left. \frac{\partial C}{\partial \eta} \right|_{\Gamma_2} = kC.$$

Meyer hace una aplicación de su modelo a mares costeros, en la isla de São Sebastião (Brasil), en este estudio emplea el siguiente modelo:

$$\frac{\partial C(x, y, t)}{\partial t} = \operatorname{div} \left( D \nabla C - \vec{V} C \right) - \sigma C + f(x, y, t), \quad (3.6)$$

$(x, y) \in \Omega, \Omega \subset \mathbb{R}^2, t \in (0, T].$

La condición inicial para este estudio es:

$$C(x, y, 0) = C_0(x, y), \quad (3.7)$$

y las condiciones de frontera son:

$$1. -D \left. \frac{\partial C}{\partial n} \right|_{\Gamma_0} = g_0(x, y, t) \quad (3.8)$$

$$2. -D \left. \frac{\partial C}{\partial \eta} \right|_{\Gamma_1} = g_1(x, y, t) \quad (3.9)$$

$$3. -D \left. \frac{\partial C}{\partial \eta} \right|_{\Gamma_2} = q \vec{V}_n C. \quad (3.10)$$

Él supone que si en (3.8) y (3.9),  $g_0 = g_1 = 0$ , significa que hay una parte de la frontera, por la cual no hay paso de contaminante y que hay otra parte de la frontera, que está suficientemente lejos de ella, por lo tanto, se puede considerar que hasta allá no llegará el contaminante. Para la condición 3, supone que el paso de contaminante es proporcional a la intensidad de la corriente marina.

Nuevamente,  $D$  y  $\sigma$  son considerados constantes, y el vector velocidad es  $\vec{V} = (V_1(x, y), V_2(x, y))$ .

Como el modelo empleado por Meyer (Meyer, 2000) en una superficie plana, no es lo suficientemente bondadoso para aplicarlo en el océano, dadas las diferencias geométricas de las regiones de trabajo, se hace necesario reformularlo. Para hacer la extensión del modelo, se requieren entonces, de las expresiones para el gradiente, la divergencia y el laplaciano \*\*\*\* en el sistema coordenado esférico.

Las expresiones matemáticas de las derivadas ya citadas, están íntimamente ligadas al uso de los factores de escala. Esto sucede porque en el sistema coordenado cartesiano, un incremento en alguna de las variables involucradas, es proporcional a la magnitud de un desplazamiento espacial, lo que no sucede en los otros sistemas coordenados. Son entonces, los factores de escala los que permiten corregir las posibles distorsiones que se generen al pasar del sistema cartesiano a los sistemas curvilíneos. A continuación se tienen las expresiones matemáticas \*\*\*\*\* para el gradiente, la divergencia y el laplaciano en los sistemas curvilíneos.

▷ gradiente:

$$\nabla f = \frac{1}{h_1} \frac{\partial f}{\partial u_1} + \frac{1}{h_2} \frac{\partial f}{\partial u_2} + \frac{1}{h_3} \frac{\partial f}{\partial u_3}. \quad (3.11)$$

▷ divergencia:

$$\text{div} F = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[ \frac{\partial (h_2 h_3 F_1)}{\partial u_1} + \frac{\partial (h_1 h_3 F_2)}{\partial u_2} + \frac{\partial (h_1 h_2 F_3)}{\partial u_3} \right]. \quad (3.12)$$

\*\*\*\* Ya que éstas son las derivadas involucradas en el modelo cartesiano.

\*\*\*\*\* Los términos  $h_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , son los factores de escala.

▷ laplaciano:

$$\nabla^2 f = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[ \frac{\partial}{\partial u_1} \left( \frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial f}{\partial u_1} \right) + \frac{\partial}{\partial u_2} \left( \frac{h_1 h_3}{h_2} \frac{\partial f}{\partial u_2} \right) + \frac{\partial}{\partial u_3} \left( \frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial f}{\partial u_3} \right) \right]. \quad (3.13)$$

### 3.1. Sistema de coordenadas esféricas

La elección del sistema de coordenadas esféricas para la extensión del modelo, se explica por su similitud con la superficie oceánica.

En el sistema de coordenadas esféricas  $\rho$  denota la distancia del origen  $o$  al punto  $\hat{p}(\rho, \lambda, \phi)$ ,  $\lambda$  es el ángulo que se forma al proyectar el vector  $o\hat{p}$  en el plano  $xy$  y la parte positiva del eje  $x$ ; y,  $\phi$  va a ser el ángulo que se forma entre el vector  $o\hat{p}$  y la proyección del mismo en el plano  $xy$ . Tenemos así que la variación de estos parámetros es  $\rho \geq 0$ ,  $0 \leq \lambda \leq 2\pi$  y  $-\pi/2 \leq \phi \leq \pi/2$ .

Como los factores de escala en coordenadas esféricas polares son:

$$h_\rho = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \rho} \right| = 1; \quad h_\lambda = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \lambda} \right| = \rho \cos \phi; \quad h_\phi = \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} \right| = \rho, \quad (3.14)$$

las expresiones para el gradiente, la divergencia y el laplaciano en coordenadas esféricas resultan ser:

▷ Gradiente:

$$\nabla f = \left( \frac{\partial f}{\partial \rho}, \frac{1}{\rho \cos \phi} \frac{\partial f}{\partial \lambda}, \frac{1}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \phi} \right). \quad (3.15)$$

▷ Divergencia:

$$\text{div} F = \nabla \cdot F = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial (\rho^2 F_\rho)}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho \cos \phi} \frac{\partial F_\lambda}{\partial \lambda} + \frac{1}{\rho \cos \phi} \frac{\partial (\cos \phi F_\phi)}{\partial \phi}. \quad (3.16)$$

▷ Laplaciano:

$$\nabla^2 f = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho^2 \frac{\partial f}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2 \cos^2 \phi} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left( \frac{\partial^2 f}{\partial \lambda^2} \right) + \frac{1}{\rho^2 \cos \phi} \frac{\partial}{\partial \phi} \left( \cos \phi \frac{\partial f}{\partial \phi} \right). \quad (3.17)$$

## 4. Extensión del modelo de difusión

El interés del presente trabajo es mostrar como se puede expresar la difusión de partículas sobre la superficie esférica. Para esto, se tienen en cuenta dos aspectos: primero, considerar inicialmente una esfera de radio (1), lo que implica que las variaciones a lo largo del radio esférico serán nulas y por lo tanto no aparecerán en la ecuación que modela la difusión de partículas en la superficie esférica. La segunda es que debido a que  $\rho = 1$ , la difusión de partículas estará determinada por las variaciones angulares  $\lambda$  y  $\phi$  de las coordenadas esféricas, como también de la velocidad de la corriente marina, de la reacción de las partículas con el medio y de la existencia de una posible fuente o sumidero de partículas.

Teniendo en cuenta los términos para la degradación y generación neta de las partículas, como también la influencia de la velocidad del fluido, se tiene entonces, que el modelo bidimensional, extendido en la superficie esférica, queda expresado como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(x, y, t)}{\partial t} = & D \left[ \frac{1}{\cos^2 \phi} \left( \frac{\partial^2 C}{\partial \lambda^2} \right) + \frac{\partial^2 C}{\partial \phi^2} - \tan \phi \frac{\partial C}{\partial \phi} \right] \\ & - \left[ \frac{V_1}{\cos \phi} \frac{\partial C}{\partial \lambda} + V_2 \frac{\partial C}{\partial \phi} \right] - \sigma C + f(\lambda, \phi, t), \quad (4.18) \\ & (\lambda, \phi) \in \Omega, \Omega \subseteq S^2 \text{ y } t \in [0, T], \\ & \partial\Omega = \phi_0 \cup \lambda_0 \cup \phi_1 \cup \lambda_1, \end{aligned}$$

en donde:

- La difusividad  $D$  es constante, en cualquier dirección.
- El decaimiento  $\sigma$  es directamente proporcional a la concentración del contaminante y es considerado constante.
- La velocidad  $\vec{V}$  de la corriente marina varía en el espacio,

$$\vec{V} = (V_1(\lambda, \phi), V_2(\lambda, \phi)).$$



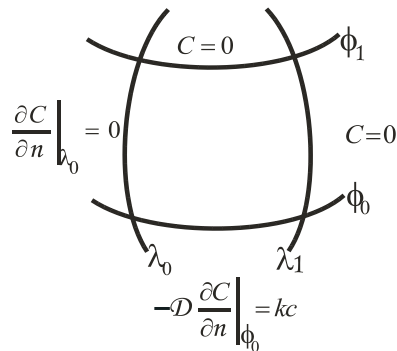


Figura 1: Condiciones de frontera

- El término  $f$  es el mismo que en el modelo tridimensional cartesiano.

Las condiciones iniciales y de frontera para el modelo están dadas por:

Condición inicial:

$$C(\lambda, \phi, 0) = C_0(\lambda, \phi) \tag{4.19}$$

Condiciones de frontera:

$$1. C \Big|_{\phi_1} = 0 \quad 2. C \Big|_{\lambda_1} = 0 \quad 3. \frac{\partial C}{\partial \eta} \Big|_{\lambda_0} = 0 \quad 4. -D \frac{\partial C}{\partial \eta} \Big|_{\phi_0} = kC. \tag{4.20}$$

Las condiciones iniciales 1 y 2, en(4.20) significan que están suficientemente lejos de la región de concentración de contaminante, por lo que por ahí no alcanzarán a difundirse partículas contaminantes. La tercera condición expresa que si la velocidad de la corriente marina, va en esa dirección, no habrá difusión de contaminante, en dirección opuesta a dicha velocidad; finalmente, la última condición nos indica que el paso de contaminante, es proporcional a la cantidad de contaminante presente. La gráfica de 1 ilustra la situación.

Las dos primeras condiciones son las de Dirichlet, la tercera es la de Von Neumann y la cuarta corresponde a una condición de Robin.

## 5. Confrontación de los modelos

Los modelos son confrontados por medio de dos simulaciones: una para el modelo planteado por Meyer y otra correspondiente al modelo extendido a la superficie esférica. Las simulaciones fueron programadas en Matlab 6.5, utilizando el método explícito de diferencias progresivas.

Los datos para las simulaciones se obtienen al tomar como partícula contaminante el petróleo, los valores para el coeficiente de difusión, coeficiente de degradación y campo de velocidades fueron sugeridos por Meyer.

### 5.1. Análisis de resultados de las simulaciones

Considerando además de la parte difusiva de ambos modelos, los términos de degradación, campo de velocidades y generación neta de partículas, se obtienen los siguientes resultados:

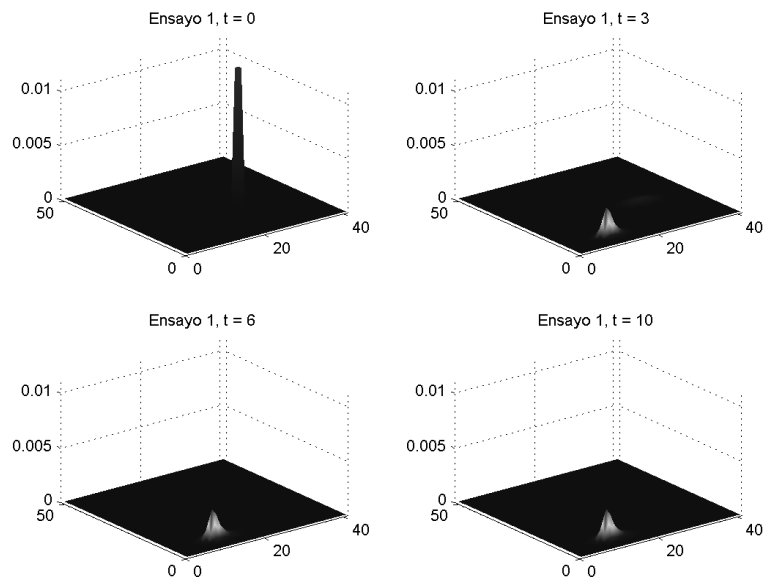


Figura 2: Difusión cartesiana

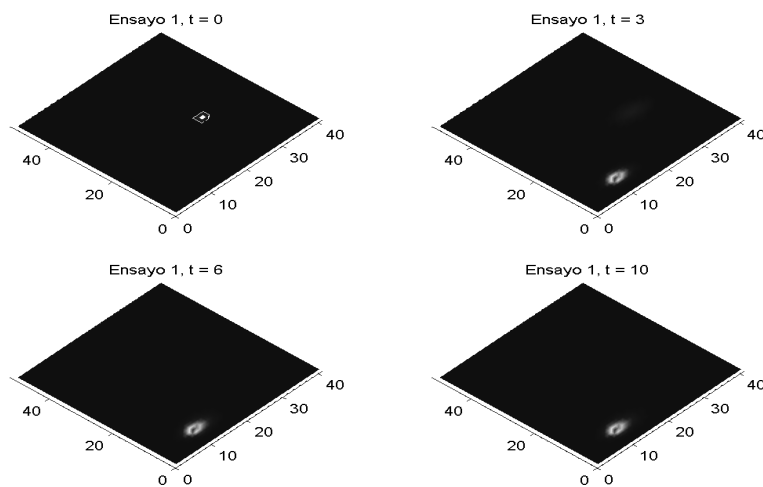


Figura 3: Difusión cartesiana vista superior

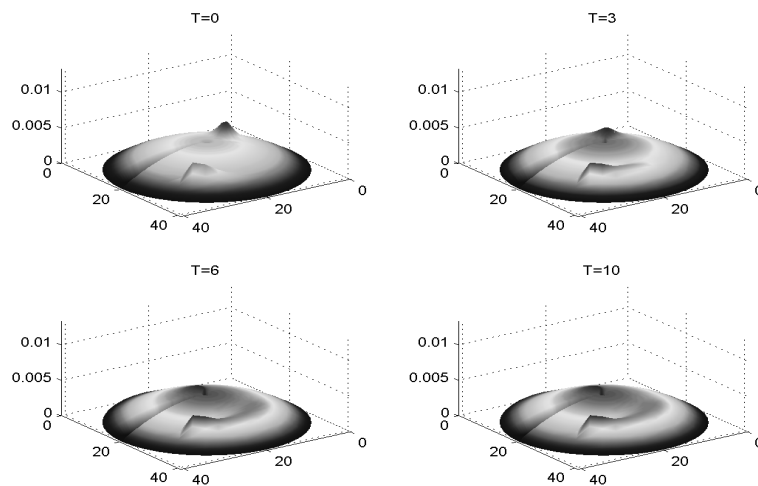


Figura 4: Difusión esférica

Para el modelo cartesiano se puede observar que la concentración inicial rápidamente se difunde por el medio, mientras la fuente va aumentando poco a poco, en tanto que para el modelo esférico las gráficas muestran como la concentración inicial se va difundiéndose y también va siendo transportada por el campo de velocidades, es decir, hay difusión y advección, igual situación se

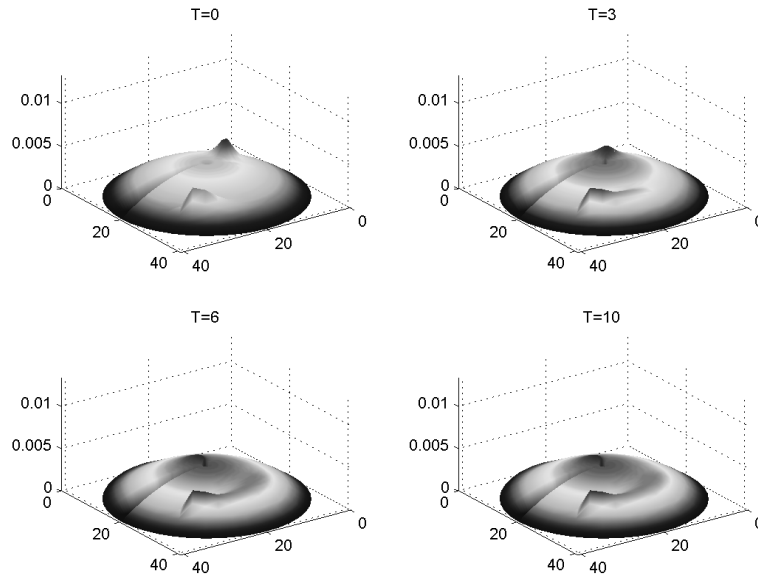


Figura 5: Difusión esférica vista superior

puede apreciar para la fuente neta de generación de partículas contaminantes.

Esto permite afirmar que existe una diferencia significativa entre las simulaciones de los dos modelos, por lo que se justifica la realización del presente trabajo.

## 6. Resultados

1. El modelo obtenido es más aproximado a la realidad que el modelo inicial, por cuanto tiene presente la curvatura de la tierra, esto gracias a la influencia de los factores de escala.
2. Existe una diferencia al emplear los dos modelos en la superficie esférica, esto se puede apreciar en los resultados gráficos de las simulaciones hechas.
3. Aunque el modelo presente una discontinuidad en  $\phi = \pi/2$ , (en los

polos).

4. El trabajo deja la posibilidad de seguir profundizando en el modelo extendido, en los siguientes aspectos:
  - a) Puede pensarse en tomar  $\rho$  diferente de 1 y analizar los resultados.
  - b) Estudiar la difusión de partículas en las tres variables espaciales:  $\rho$ ,  $\lambda$  y  $\phi$ .
  - c) Tomar a  $D$  y  $\sigma$  variando en espacio y en el tiempo.

## Referencias

- Burden, R. J. y Faires, J. D. (1985). *Análisis Numérico*. Grupo Editorial Iberoamericana.
- Cranck, J. (1964). *The Mathematics of Difusion*. Oxford at the Clarendon Press.
- Departamento de Física Aplicada III (2003/2004). Sistemas de coordenadas ortogonales. Universidad de Sevilla, Sevilla, España.
- Edelstein-Keshet, L. (1988). *Mathematical Models in Biology*. Random-House, N. York.
- James, W. R. y *et al.* (1982). *Fundamentos de transferencia de momento, calor y masa*. Lymusa.
- Meyer, J. F. C. A. (2000). Modelos matemáticos de impacto ambiental: uma visão introdutória. Notas de aula, IMECC–UNICAMP, Campinas/Sp, Brasil.
- Murray, J. D. (1991). *Mathematical Biology*. Springer, N. York, second edition.

Okubo, A. (1980). *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models*. Springer, N. York.

Pita Ruiz, C. (1995). *Cálculo Vectorial*. Prentice Hall, México.