MODELACIÓN MATEMÁTICA

Una introducción al método

Profesor: Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE, Ph.D.
Página Web: http://mathmodelling.googlepages.com
e-mail: e.dominguez@javeriana.edu.co

MODELOS EN ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES

MODELACIÓN MATEMÁTICA DE LA MIGRACIÓN DE CONTAMINANTES

La migración de contaminantes es un caso particular de los fenómenos de transporte, es decir de aquellos procesos en los que hay transferencia de masa, energía, momento o información. Los fenómenos de transporte agrupan a la ley de Fick, a la ecuación de conductividad térmica de Fourier, a la difusión de electrones en un campo eléctrico, a la acción de un campo gravitatorio (baro-difusión) y a la evolución de curvas de densidad probabilística en un isomorfismo muy aplicado en diferentes ciencias para la solución de problemas prácticos (Véase figura 1).

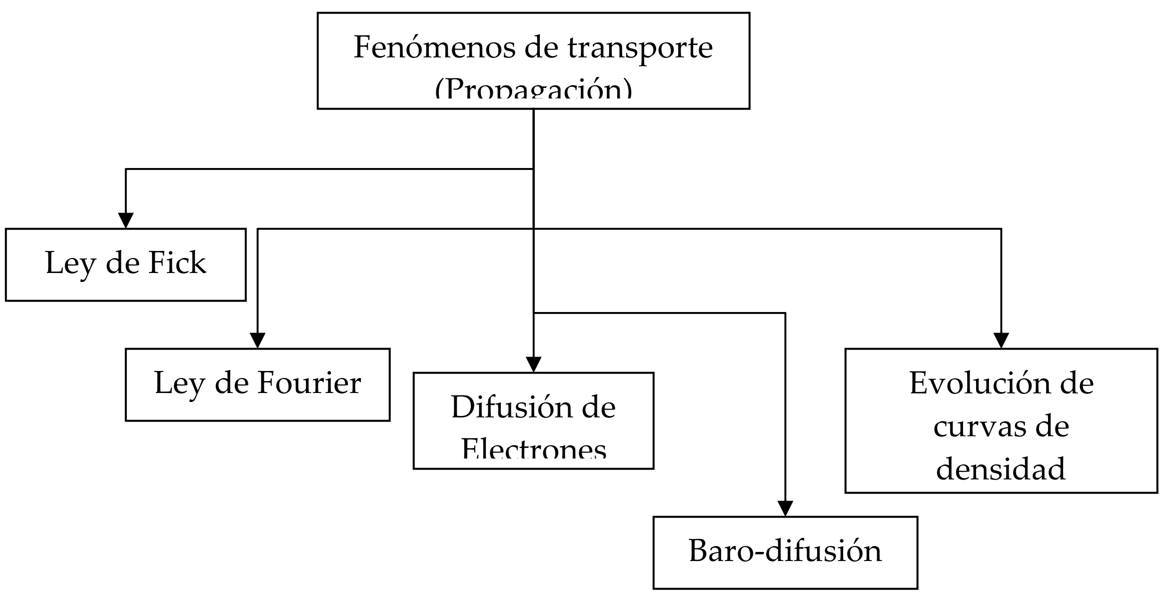

Figura 1. Elementos del isomorfismo de los fenómenos de propagación

La migración de componentes químicos en el agua se realiza, principalmente, gracias a mecanismos de advección – difusión, a los cuales se les suele sumar las reacciones de componentes químicos no conservativos.

Las formas de transporte que se presentan en la migración de contaminantes en el agua son las siguientes:

Transporte advectivo

La advección (del lat. *advectĭo, -ōnis*, transporte, conducción) es una de las formas básicas de transporte de componentes químicos en el agua. Se realiza bajo la acción del gradiente hidráulico y se define por la velocidad del fluido en que se disuelve al contaminante.

Transporte convectivo

La convección (del lat. *convectĭo*) es producido por la diferencia entre la densidad de la sustancia química ρ_c y la del agua ρ_a. Esta diferencia produce una estratificación gravitacional en la mezcla fluido–componente. Generalmente este transporte es de orden vertical con una velocidad $v_\rho = k_z \Delta\overline{\rho}$ $(\Delta\overline{\rho} = (\rho_c - \rho_a)/\rho_a)$. Diferencias de unos cuantos gramos por litro en la mineralización de las sustancias que se mezclan no producen efectos convectivos. Cuando la diferencia en densidades es significativa no se puede separar la modelación del movimiento del fluido de la modelación del trasporte de sustancias dado que el trasporte convectivo de sustancias puede alterar el régimen de flujo del medio disolvente.

Transporte difusivo

La difusión (del lat. *diffusĭo, -ōnis*) se ocasiona por la presencia de gradientes de concentración. Su intensidad se define por la ley de Fick. El parámetro que controla el proceso es el coeficiente de difusión molecular D_M . Los valores de este coeficiente alcanzan valores de (1 a 2) $10^{-4}\,\frac{m^2}{dia}$. La ley de Fick afirma que la densidad de corriente de partículas es proporcional al gradiente de concentración

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana
http:// mathmodelling.googlepages.com

«$-D\frac{\partial C}{\partial x}$». La constante de proporcionalidad se denomina coeficiente de difusión D y es característico tanto del soluto como del medio en el que se disuelve.

Difusión turbulenta[1]

Es consecuencia de la componente aleatoria del campo de velocidad que define el movimiento real del agua. Este proceso es controlado por el coeficiente de de difusión Turbulenta D_T el cual está en función de la velocidad media del agua $D_T = f(v)$.

Generalmente se estudian los efectos de la difusión turbulenta y molecular con un solo coeficiente $D = D_M + D_T$.

Bases para la construcción de modelos de migración de contaminantes en el agua

El balance de sustancias en un volumen representativo, infinitamente pequeño, en el cual se presentan procesos de advección dispersión se puede modelar del siguiente modo:

El transporte efectivo de sustancia J_* en las direcciones x, y y z tiene un componente advectivo y otro difusivo y se define como:

$J_x = v_x C - D_x \frac{\partial C}{\partial x}$	(1)
$J_y = v_y C - D_y \frac{\partial C}{\partial y}$	(2)
$J_z = v_z C - D_z \frac{\partial C}{\partial z}$	(3)

Donde:

v_x	–	Velocidad del flujo de agua en el sentido x

[1] Algunos autores utilizan el término «dispersión hidrodinámica»

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana
http:// mathmodelling.googlepages.com

v_y	–	Velocidad del flujo de agua en el sentido y
v_z	–	Velocidad del flujo de agua en el sentido z
C	–	Concentración del contaminante
D_x	–	Coeficiente de difusión en el sentido x
D_y	–	Coeficiente de difusión en el sentido y
D_z	–	Coeficiente de difusión en el sentido z

La taza de cambio de la concentración en el tiempo es igual $\frac{\partial C}{\partial t}$ y bajo la condición de densidad constante para el solvente la ley de conservación se puede expresar como sigue:

$$\nabla J = \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} \tag{4}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla J + w(C, x, y, z, t) = 0 \tag{5}$$

$w(C, x, y, z, t)$ representa a las fuentes y sumideros del soluto. La ecuación (5) para un sistema de contaminantes disueltos en un cuerpo tridimensional de agua se escribe de la siguiente forma:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + v_x \frac{\partial C_i}{\partial x} + v_y \frac{\partial C_i}{\partial y} + v_z \frac{\partial C_i}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} D_x \frac{\partial C_i}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} D_y \frac{\partial C_i}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial z} D_z \frac{\partial C_i}{\partial z} = w(C, x, y, z, t) \tag{6}$$

Donde i - toma valores de 1 a n, siendo n el número de contaminantes disueltos en el cuerpo de agua.

Para el caso en el que el coeficiente de difusión D no depende del espacio, la ecuación (6), para un solo contaminante, se simplifica como se muestra a continuación:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} + v_z \frac{\partial C}{\partial z} - D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = w(C, x, y, z, t) \tag{7}$$

Dado un proceso de transporte de contaminantes definido en el intervalo de tiempo $0 \le t \le m$, para solucionar las ecuaciones (5), (6) ó (7) se requieren condiciones iniciales y de frontera.

Si Ω es el dominio espacial en el que trascurre el flujo de agua, entonces: $\forall(x, y, z,) \in \Omega$ debe estar definido el comportamiento de la concentración en el momento inicial $t = 0$. Es decir se debe conocer la función $C(x, y, z) = C(x, y, z, t_{t=0})$, donde $(x, y, z,) \in \Omega$.

Si Γ define el polígono perímetral de Ω, entonces $\forall(x, y, z,) \in \Gamma$ debe existir una función $C(t)$ que defina el comportamiento de la concentración en el punto fronterizo durante todo el intervalo de simulación.

Simulación de la migración de contaminantes con el flujo por canales abiertos

Dado un flujo de agua concentrado en un canal, la ecuación (7) se simplifica como se presenta a continuación:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v\frac{\partial C}{\partial x} - D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - = w(C, x, t) \qquad (8)$$

Para este caso v se obtiene de la solución de un modelo de tránsito hidráulico. Una variante de estos puede ser el de la onda cinemática con secciones transversales y coeficientes de rugosidad variables. El valor del coeficiente de difusión también se puede establecer en función de los parámetros hidráulicos del flujo unidimensional del agua de la siguiente forma (GGI, 1987):

$$D = \frac{ghv}{MC*} \qquad (9)$$

Donde:

v	–	Velocidad del flujo de agua en el sentido x
g	–	Aceleración en caída libre

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana
http:// mathmodelling.googlepages.com

h	–	Profundidad media del agua
C^*	–	Coeficiente de Chezy
M	–	Coeficiente dependiente de C^*

Cuando $10 < C^* \leq 60 \Rightarrow M = 0.7C^* + 6$, si $C^* \geq 60 \Rightarrow M = const = 48$. Las unidades del producto MC^* son m/s^2.

La solución numérica para la ecuación en derivadas parciales (8) se plantea utilizando las siguientes aproximaciones en diferencias finitas:

$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{C_{i,j+1} - C_{i,j}}{\Delta t}$	(10)
$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{k_d(C_{i+1,j} - C_{i,j}) + k_{iz}(C_{i,j} - C_{i-1,j})}{\Delta x}$	(11)
$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{(C_{i+1,j} - 2C_{i,j} + C_{i-1,j})}{\Delta x^2}$	(12)
$w(C,x,t) = w_{i,j}$	(13)

Las diferencias finitas presentadas en (10), (11), (12) y (13) son explicitas, al tomarlas en cuenta para construir el análogo finito de (8) se obtiene:

$$\frac{C_{i,j+1} - C_{i,j}}{\Delta t} + v\frac{k_d(C_{i+1,j} - C_{i,j}) + k_{iz}(C_{i,j} - C_{i-1,j})}{\Delta x} - D\frac{(C_{i+1,j} - 2C_{i,j} + C_{i-1,j})}{\Delta x^2} = w_{i,j} \quad (14)$$

La ecuación (14) representa un esquema numérico explicito y bidireccional cuya condición de estabilidad es:

$$\frac{\Delta t D}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad (15)$$

El esquema numérico (14) presenta dos dificultades. La primera de ellas esta relacionada a la acumulación progresiva del error de truncamiento y la segunda a la aparición de la difusión numérica. Gracias a la potencia actual de los ordenadores y al enorme número de decimales que pueden manejar los tipos de datos implementados en los lenguajes de programación modernos la primera falla es importante para mallas numéricas de gran tamaño y densidad y en aquellos problemas de simulación con componentes no lineales de alto orden. El segundo

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana
http:// mathmodelling.googlepages.com

problema es más significativo y consiste en la aparición de difusión incluso en las simulaciones donde se adopta un coeficiente de difusión nulo ($D = 0$). No existe forma de evitar la difusión numérica.

Simulación de la migración de contaminantes con el flujo superficial, bidimensional, por laderas

Un caso interesante es la migración de contaminantes sobre la superficie de una cuenca. La simulación de este proceso puede ser útil como herramienta para la toma de decisiones en agricultura de precisión ó en localización de rellenos sanitarios (entre otros). Para enfrentar este tipo de simulaciones, asumiendo que las diferencias de densidad no ocasionan flujos convectivos significativos, se debe resolver el modelo de flujo bidimensional primero (véase módulo sobre la onda cinemática bidimensional y su esquema en diferencias finitas en el enlace http://mathmodelling.googlepages.com/OndaCinemtica2D.pdf), después con los campos de profundidades de lámina y de velocidad, atendiendo a las condiciones iniciales y de frontera para el problema de migración de contaminantes, se resuelve una ecuación del tipo (6) o (7). Sí la ecuación es del tipo (6) se debe tomar en cuenta no sólo el término de fuentes y sumideros de contaminantes sino también las posibles cinéticas de reacción entre especies químicas. Para abordar el tema, imaginando una superficie del tipo libro abierto, por la cual, el ángulo interior del dorso (formado por la intercepción de las cubiertas) representa el canal principal en la cuenca y las cubiertas son las laderas de la cuenca en las que ocurre el flujo bidimensional del agua (véase figura 2).

En esas laderas es posible imaginar una actividad de agricultura en las que el abono es la fuente de nutrientes, contaminantes del agua que escurre por las laderas y que finalmente alcanza el cauce principal. En general el movimiento del agua en el cauce principal debe ser simulado con una onda unidimensional al igual que el proceso de migración de contaminantes. Esto significa que los vectores de flujo bidimensional del agua y de migración bidimensional de contaminantes deben alimentar al modelo de transito hidráulico y de advección – difusión (unidimensionales) en el canal como condiciones de fronteras internas. Estas condiciones se enlazan en la intersección de los nodos internos de cálculo en el canal y los nodos adyacentes al canal en las grillas de flujo del agua y de migración de contaminantes bidimensionales.

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana
http:// mathmodelling.googlepages.com

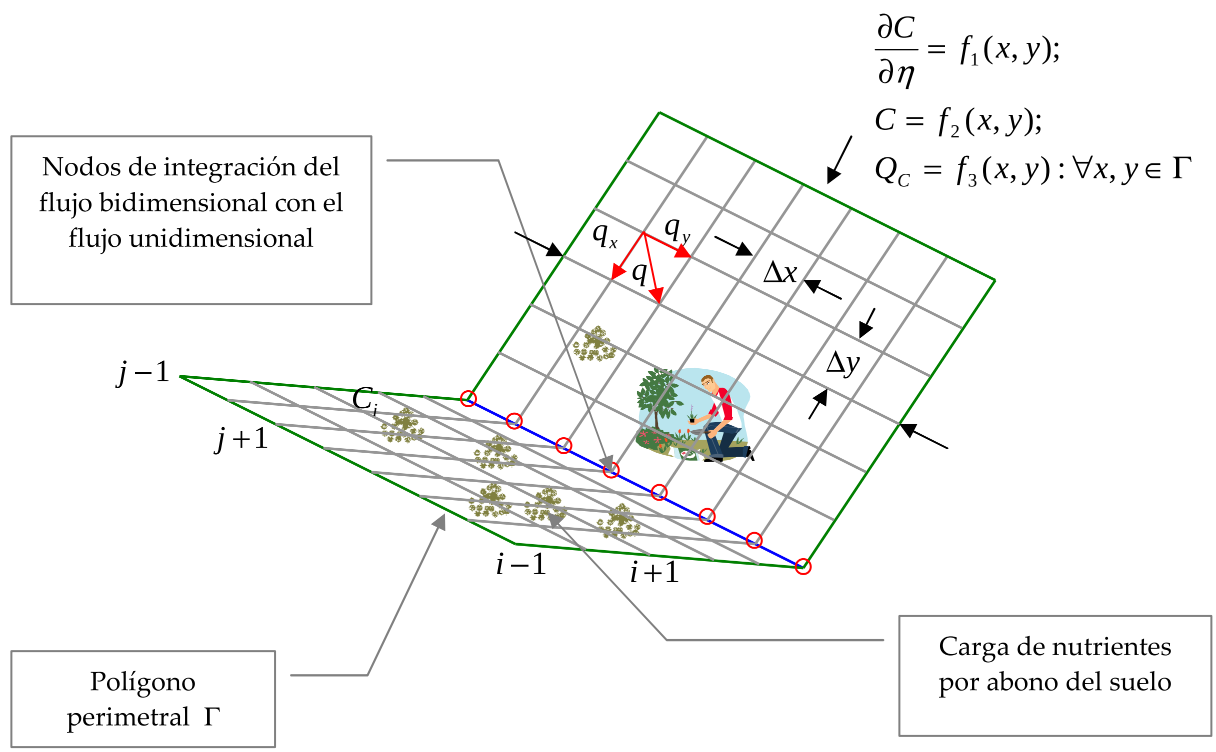

Figura 2. Dominio espacial para la simulación de la migración de contaminantes con el flujo bidimensional por laderas.

La migración de contaminantes por laderas se resuelve en dos dimensiones espaciales. Para una sola especie química la ecuación que gobierna el proceso es de la forma:

$\frac{\partial C}{\partial t} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} + - D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - = w(C, x, y, t)$	(16)

La concentración se puede determinar teniendo en cuenta que la solución del modelo de flujo bidimensional provee el comportamiento de la profundidad de la lámina de agua como una función de las coordenadas y del tiempo -$h = f(x, y, t)$-, recordando que la concentración es la relación entre la masa y el volumen que la contiene y utilizando las características de la grilla espacial el volumen se establece como:

$W = h\Delta x\Delta y$	(17)
$W = q\Delta t$	(18)

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana
http:// mathmodelling.googlepages.com

Entonces la concentración de nutrientes dependerá de la profundidad de lámina del siguiente modo:

$C = \frac{m}{W} = \frac{m}{h\Delta x \Delta y}$	(19)
$C = \frac{m}{q\Delta t}$	(20)

Dado que la profundidad de lámina $h = f(x, y, t)$ fluctúa es necesario introducir el concepto de solubilidad máxima $S_{\max}$, el cual establece la concentración de saturación C_{sat}, la cual después de alcanzada impide que el soluto se siga diluyendo. Finalmente es necesario tener presente que el metabolismo de las plantas abonadas remueve una parte de los nutrientes para el aumento de su biomasa (véase figura 3).

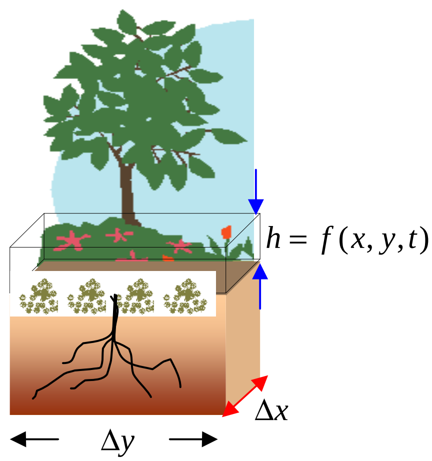

Figura 3. Para la explicación de la formula (19) y del concepto de $S_{\max}$ y de C_{sat}

El problema de la migración de contaminantes por las laderas de una cuenca constituye un problema de Dirichlet. Para resolverlo es necesario establecer condiciones iniciales y de frontera. En la frontera (polígono perimetral Γ) se puede establecer una condición de concentración constante, gradiente de concentración constante o carga contaminante constante (expresada en unidades de masa). En forma más general se pueden establecer combinaciones de las siguientes condiciones de frontera:

$\dfrac{\partial C}{\partial \eta} = f_1(x, y);$	(20)
$C = f_2(x, y);$	(21)
$Q_C = f_3(x, y)$	(22)

Donde η es la normal al punto fronterizo y Q_C es la carga contaminante en unidades de masa.

Para resolver la ecuación (16) con el método de diferencias finitas, tomando como índice de los nodos de tiempo a k, de la dirección x a i y de la dirección y a j se plantean las siguientes sustituciones de las diferenciales:

$\dfrac{\partial C}{\partial t} = \dfrac{C_{i,j}^{k+1} - C_{i,j}^{k}}{\Delta t};$	(23)
$\dfrac{\partial C}{\partial x} = \dfrac{k_d(C_{i+1,j}^{k} - C_{i,j}^{k}) + k_{iz}(C_{i,j}^{k} - C_{i-1,j}^{k})}{\Delta x} = \Phi_x;$	(24)
$\dfrac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \dfrac{(C_{i+1,j}^{k} - 2C_{i,j}^{k} + C_{i-1,j}^{k})}{\Delta x^2} = \delta_x;$	(25)
$\dfrac{\partial C}{\partial y} = \dfrac{k_d(C_{i,j+1}^{k} - C_{i,j}^{k}) + k_{iz}(C_{i,j}^{k} - C_{i,j-1}^{k})}{\Delta y} = \Phi_y;$	(26)
$\dfrac{\partial^2 C}{\partial y^2} = \dfrac{(C_{i,j+1}^{k} - 2C_{i,j}^{k} + C_{i,j-1}^{k})}{\Delta y^2} = \delta_y;$	(27)
$w(C, x, y, t) = w_{i,j}^{k}.$	(28)

Tomando en cuenta las ecuaciones (23) a (28) se puede componer el siguiente esquema explícito, bidireccional y bidimensional:

$\dfrac{C_{i,j}^{k+1} - C_{i,j}^{k}}{\Delta t} + \Phi_x + \Phi_y + \delta_x + \delta_y = w_{i,j}^{k}$	(29)

Los coeficientes k_d y k_{iz} son coeficientes direccionales que toman sus valores de acuerdo al signo del vector de velocidad en cada nodo de cálculo:

$k_d = 1;\ k_{iz} = 0 \Leftrightarrow v_* > 0;$	(30)
$k_d = 0;\ k_{iz} = 1 \Leftrightarrow v_* \leq 0$	(31)

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana
http:// mathmodelling.googlepages.com

La condición de estabilidad para (29) es:

$v_x \frac{\Delta t}{\Delta x} + v_y \frac{\Delta t}{\Delta y} \leq 1;$	(32)
$\frac{\Delta t D_x}{\Delta x} + \frac{\Delta t D_y}{\Delta y} \leq \frac{1}{2}$	(33)

La condición (33) es más fuerte que la condición (32), por ello si se satisface (33) (32) también estará satisfecha. Sin embargo el cumplimiento simultáneo de (32) y (33) no garantiza la ausencia de difusión numérica en los nodos del dominio espacio – temporal de simulación. Sí la componente advectiva es más fuerte que la difusiva es conveniente anular los términos difusivos de la ecuación (29) y cumplir la condición (32). Para saber cual término es más significativo (si el advectivo o el difusivo se puede usar el número de Peclet Pe:

$Pe_x = \frac{v_x \Delta x}{D_x}$	(34)
$Pe_y = \frac{v_y \Delta y}{D_y}$	(35)

Si $Pe_* > 3$ la advección es dominante y la solución es insensible al coeficiente de difusión.

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana
http:// mathmodelling.googlepages.com

Bibliografía

GGI, 1987: *Bases metodológicas para la evaluación y reglamentación de la influencia antrópica en la calidad del agua superficial*. Editor: A.V. Karaushev. Leningrado, Guidrometeoizdat, 288 p. [ГГИ. Методические основы оценки и регламентирования антропогенного влияния на качество поверхностных вод. Под редакцией А.В. Караушева. Издание 2.е, переработанное и дополненное. Ленинград, Гидрометеоиздат, 1987, 288 с.]

DHI, 1998: *Mike – SHE, Advection – Dispersión, Particle Tracking, Sorption – Degradation User Guide and Thecnical Refererence*. Copenhagen.

Angel Franco García, 2006: *Física con el ordenador – curso interactivo de física en Internet – Fenómenos de transporte*. Universidad del País Vasco – Dirección en Internet http://www.sc.ehu.es/sbweb/fisica/transporte/transporte.htm

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana
http:// mathmodelling.googlepages.com