

## Aproximación y simulación de un modelo de dispersión de contaminantes sobre superficies esféricas

CARMEN ALICIA RAMÍREZ BERNATE & GERALDO LUCIO DINIZ  
Universidad del Quindío, Armenia, Colombia

**ABSTRACT.** In this work, we present an approach and simulation of evolutionary process for pollutant dispersal on spherical surfaces. The numerical code of simulations was made by finite elements method (FEM). In the model, we consider the diffusion process, the transport phenomena by the mean, the decay in global sense and a pollutant source. For the classical diffusion-reaction equation we obtained the weak formulation in the sense of applying the finite elements method. This model is being studied by group of Phenomena Modelling of Macroscopic Diffusion in the Biomathematics at the University of Quindío, Colombia. The authors believe that the importance of this work is its potential use in environmental processes for the definition of strategies of evaluation, preventive and cleaning.

*Key words and phrases.* Numerical approximation, Computational simulations, Dispersion, Finite elements method (FEM), Spherical surfaces.

*2000 AMS Mathematics Subject Classification.* Primary: 54H25. Secondary: 47H10.

**RESUMEN.** En este trabajo, presentamos una aproximación numérica y algunas simulaciones del proceso evolutivo de la dispersión de contaminantes sobre superficies esféricas. El código numérico para la simulación se desarrolló por el método de elementos finitos (MEF). En el modelo, consideramos el proceso de la difusión, el fenómeno de transporte por el medio, el decaimiento en sentido global y una fuente de contaminantes. Para la clásica ecuación de difusión-reacción obtuvimos la formulación débil en el sentido de aplicar el método de elementos finitos. Este modelo ha sido estudiado por el grupo de Modelamiento de Fenómenos

de Difusión Macroscópica del programa de Maestría en Biomatemáticas en la Universidad del Quindío, Colombia. Creemos que la importancia del trabajo desarrollado conduce a su uso potencial en procesos de medio ambiente para la definición de estrategias evaluativas, preventivas y de limpieza.

## 1. Introducción

La dispersión de partículas contaminantes ha sido estudiada principalmente, a través de modelos matemáticos en ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales que tienen en cuenta el movimiento de las partículas a lo largo y ancho del medio de propagación. Por esta vía se puede analizar la dispersión de partículas contaminantes a través del tiempo.

En este sentido, un modelo de dispersión de partículas contaminantes sobre superficies esféricas fue propuesto por MÉNDEZ (2005), a través de una adaptación de los operadores gradiente y laplaciano y de esta manera se extienden las ecuaciones de difusión superficial euclidiana a fenómenos de difusión en superficies esféricas.

Este modelo de difusión en superficies esféricas tiene soluciones analíticas exactas, pero obtenerlas es demasiado complejo, esto es, los procedimientos analíticos que permitan determinar la concentración del contaminante modelado en un tiempo y lugar determinado no están en las metas de este trabajo. Lo que se propone en este trabajo es, entonces, la posibilidad de analizar este último modelo por la vía de la aproximación numérica y la simulación computacional de escenarios.

La determinación de la contaminación del agua es de gran interés para establecer controles encaminados a la conservación del ambiente. Esta determinación, y más que todo su dinámica, en muchos casos es extremadamente compleja y por esta razón el modelo matemático se convierte en una de las herramientas más efectivas ya que permite interpretar dinámicas de contaminación en cuerpos de agua. Sin embargo, el modelo como herramienta carece de utilidad sino es correctamente construido y simulado, de modo que permita conocer la concentración de contaminantes en las aguas de forma continua en el espacio y en el tiempo a partir de un mínimo de mediciones experimentales.

Algunos modelos presentados por MEYER (1998) y DINIZ (2003), han resultado muy útiles en ríos, lagos o lagunas, pero su aplicación no es tan significativa en el océano por estar construidos para superficies planas. Una extensión de este modelo de difusión a superficies esféricas fue construido por MÉNDEZ (2005).

La aproximación de la solución por el método de diferencias finitas, que es la propuesta por MÉNDEZ (2005), no es la más precisa para este tipo de situaciones. Esperamos que la alternativa que aquí proponemos, usando el método de elementos finitos, dé lugar a mejores interpretaciones al problema físico bajo estudio.

La contaminación en grandes extensiones de mar no ha sido considerada aún por quienes estudian la modelación matemática y menos aún se ha hecho algún tipo de simulación del fenómeno en caso de llegar a presentarse. Lo que se propone en el presente estudio teórico es una aproximación y simulación numérica de un modelo de dispersión de contaminantes sobre una superficie esférica con miras a una aplicación a gran escala en alta mar, donde puede llegar a tener efecto la curvatura de la tierra durante el proceso de difusión del contaminante.

Debido a las catástrofes de contaminación ambiental que han ocurrido en el del Golfo de México en 1979 y el Golfo Pérsico en 1991, por ejemplo, se hace necesario un estudio a mayor escala del fenómeno de dispersión, y en este trabajo teórico intentamos dar un pequeño paso en este camino.

Así, presentaremos, en primer lugar, el modelo con las condiciones de contorno. En seguida, la formulación débil y luego una demostración de la existencia y unicidad de las soluciones débiles y las discretizaciones espacial y temporal. Por último, haremos una presentación de los resultados obtenidos, a través de gráficos para mejor visualización y daremos algunas consideraciones finales.

**2. El modelo matemático**

En el modelo se ha considerado el fenómeno de difusión (o dispersion, según OKUBO (1980)), el transporte advectivo, una tasa de decaimiento y unas fuentes de contaminación en el medio estudiado. De esta manera llamando  $c(\lambda, \phi, t)$  la concentración (ppm) del contaminante, en el punto  $(\lambda, \phi)$ , para un instante  $t$ , el modelo puede ser descrito por:

$$\frac{\partial c(\lambda, \phi, t)}{\partial t} = \text{difusión} + \text{transporte} - \text{decaimiento} + \text{fuente},$$

donde

*difusión* =  $-\text{div}(-\alpha \nabla c)$  representa el efecto de la difusión,

*transporte* =  $-\text{div}(V.c)$  representa el transporte advectivo por las corrientes marinas o el viento,

*decaimiento* =  $\sigma c$ , linealmente aproximando decaimiento global en el ambiente y,

*fuente* =  $\mathcal{F}(\lambda, \phi, t)$ , modelando fuentes de contaminación.

De manera semejante, la ecuación evolutiva que modela la concentración de contaminantes está dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(\lambda, \phi, t)}{\partial t} &= -\text{div}(-\alpha \nabla c) - \text{div}(\vec{V}.c) - \sigma c + \mathcal{F}(\lambda, \phi, t) \quad (2.1) \\ \forall (\lambda, \phi) &\in \Omega, \quad \Omega \subset [0, 2\pi] \times \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right), t \in (0, T] \end{aligned}$$

donde  $\alpha$  es la constante del efecto difusivo en el medio considerado,  $\vec{V}$  es el campo de velocidades y,  $\sigma$  es la tasa de decaimiento global en el ambiente.

Ahora bien, aplicando los operadores diferenciales y usando el factor de escala para coordenadas esféricas, (2.1) se llega a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(\lambda, \phi, t)}{\partial t} &= \alpha(\Delta c) - v_1 \frac{1}{\cos \phi} \frac{\partial c}{\partial \lambda} - v_2 \frac{\partial c}{\partial \phi} - \sigma c + \mathcal{F}(\lambda, \phi, t) \quad (2.2) \\ \forall (\lambda, \phi) &\in \Omega, \Omega \subset [0, 2\pi] \times \left(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right), t \in (0, T] \end{aligned}$$

El dominio que consideraremos designado con  $\Omega$  tiene definida la frontera (Figura 1) por  $\partial\Omega = \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ , con  $\Gamma_i \cup \Gamma_j = \phi$ , para  $i \neq j$ .

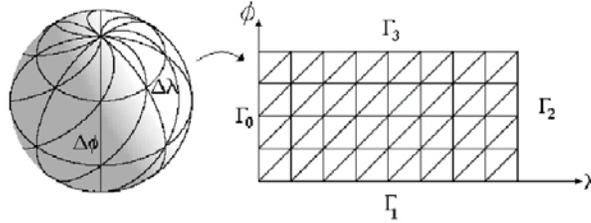


FIGURA 1. Descripción del dominio escogido

Las condiciones de frontera escogidas son

$$-\alpha \frac{\partial c}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} = k_1 g; \quad (2.3)$$

modelando una entrada de contaminante en el dominio a través de esta parte de la frontera, conforme a la función  $g$ :

$$-\alpha \frac{\partial c}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_0 \cup \Gamma_3} = 0; \quad (2.4)$$

modelando una condición asintótica en la frontera lejos del dominio,

$$-\alpha \frac{\partial c}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_2} = k_2 (c - c_e), \quad (2.5)$$

que representa el paso del contaminante dependiendo de la concentración externa y donde  $\eta$  es el vector normal unitario externo.

Sin embargo,  $\mathcal{F}(\lambda, \phi, t)$  se definirá como el término fuente en la ecuación (2.2). Consideramos en nuestra simulación al término  $\mathcal{F}(\lambda, \phi, t)$  como una fuente puntual en el centro del dominio, modelado por  $\mathcal{F}(\lambda, \phi, t) = A_0 e^{-kt}$ .

Finalmente como condición inicial consideramos

$$c(\lambda, \phi, 0) = c_0. \quad (2.6)$$

Las ecuaciones (2.3–2.5) están expresadas en su formulación clásica o fuerte, para las cuales tenemos sólidos resultados mientras se considere la existencia

y unicidad de las soluciones. Por otro lado, sin embargo, estos resultados son realmente exigentes en el sentido de que la regularidad es necesaria en los parámetros y en algunas de las condiciones.

Tendremos que recurrir a la formulación débil o variacional, un ambiente matemático mucho más permisivo, de modo que las derivadas puedan ser consideradas en el sentido de distribuciones y las integrales sean del tipo Lebesgue, una opción que permanece válida con la escogencia del método de elementos finitos, el cual usaremos para la discretización espacial. Para la variable temporal, nuestra opción de aproximación es la de Crank-Nicolson, produciendo aproximaciones de precisión de segundo orden.

### 3. Formulaci3n débil

Para la transformaci3n del sistema dado en su formulaci3n fuerte a la expresi3n débil del operador (2.2) con las condiciones de frontera (2.3–2.5). Adem3s de la propia formulaci3n fuerte, que generalmente incluye condiciones de frontera, se debe dedicar atenci3n especial a los espacios en los cuales la llamada formulaci3n se desarrolla. Adoptaremos el siguiente espacio en el cual emprenderemos la deseada aproximaci3n espacial:

$$V = \left\{ v \in \mathcal{L}^2((0, T], U) : \frac{\partial v}{\partial t} \in \mathcal{L}^2(\Omega) \right\},$$

con  $U$  definido por

$$U = \left\{ u \in H^1(\Omega) : \frac{\partial u}{\partial \eta} |_{\Gamma_0 \cup \Gamma_3} = 0 \right\}.$$

Tambi3n definiremos los productos internos dados por:

$$\begin{aligned} (f|g)_{0,\Omega} &= \int \int_{\Omega} f(\lambda, \phi) \cdot g(\lambda, \phi) d\mu & (3.1) \\ (\nabla f \parallel \nabla g)_{0,\Omega} &= \int \int_{\Omega} \nabla f(\lambda, \phi) \cdot \nabla g(\lambda, \phi) d\mu \\ \langle f|g \rangle_{0,\Gamma} &= \int_{\Gamma} f(\lambda, \phi) \cdot g(\lambda, \phi) d\gamma. \end{aligned}$$

Usando este 3ltimo producto interno apropiadamente, tenemos, en lugar de (2.2)–(2.5), lo siguiente:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial c}{\partial t} | v \right)_{0,\Omega} - \alpha (\Delta c | v)_{0,\Omega} + \left( \operatorname{div} \left[ \vec{V} \cdot c \right] | v \right)_{0,\Omega} - \sigma (c | v)_{0,\Omega} & (3.2) \\ &= (\mathcal{F} | v)_{0,\Omega} \quad \forall v \in V, t \in (0, T]. \end{aligned}$$

Para resolver el t3rmino  $-\alpha (\Delta c | v)_{0,\Omega}$  aplicamos la identidad de Green, obteniendo para este t3rmino lo siguiente:  $-\alpha (\Delta c | v) = \alpha (\nabla \cdot c \parallel \nabla v) - \alpha \left\langle \frac{\partial c}{\partial \eta} | v \right\rangle$ .

Desarrollando el término  $\left(\operatorname{div} \left[ \vec{V}.c \right] |v\right)_{0,\Omega}$ , obtenemos que

$$\left(\operatorname{div} \left[ \vec{V}.c \right] |v\right)_{0,\Omega} = \left(\vec{V}\nabla.c|v\right)_{0,\Omega},$$

ya que  $\operatorname{div}\vec{V} = 0$ . Luego la ecuación (3.2) nos queda:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial c}{\partial t}|v\right)_{0,\Omega} + \alpha(\nabla c \parallel \nabla v) - \alpha \left\langle \frac{\partial c}{\partial \eta}|v \right\rangle + \left(\vec{V}\nabla.c|v\right)_{0,\Omega} + \sigma(c|v)_{0,\Omega} \quad (3.3) \\ = (\mathcal{F}|v)_{0,\Omega}, \quad \forall v \in V. \end{aligned}$$

Así podemos denotar los correspondientes términos de la ecuación (2.2). Ahora aplicando la definición de gradiente en coordenadas esféricas, las condiciones de frontera y la definición anterior de producto interno, la ecuación (3.3) queda:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial c}{\partial t}|v\right)_{0,\Omega} + \alpha \left[ \left(\frac{1}{\cos^2 \phi} \frac{\partial c}{\partial \lambda} \frac{\partial v}{\partial \lambda}\right)_{0,\Omega} + \left(\frac{\partial c}{\partial \phi} \frac{\partial v}{\partial \lambda}\right)_{0,\Omega} \right] \\ + v_1 \left(\frac{1}{\cos \phi} \frac{\partial c}{\partial \lambda}|v\right)_{0,\Omega} + v_2 \left(\frac{\partial c}{\partial \phi}|v\right)_{0,\Omega} + \sigma(c|v)_{0,\Omega} + k_2 \langle c|v \rangle_{\Gamma_2} \quad (3.4) \\ = -k_1 \langle g|v \rangle_{\Gamma_1} + k_2 \langle c_e|v \rangle_{\Gamma_2} + (\mathcal{F}|v)_{0,\Omega}, \quad \forall v \in V. \end{aligned}$$

#### 4. Discretización del problema

Para la discretización de la ecuación (3.4), usamos el método de los elementos finitos –MEF (discretización espacial) y el método de Crank-Nicolson (discretización temporal). Esto significa que en lugar de obtener funciones en  $V$ , numéricamente obtenemos aproximaciones, en la forma:

$$c(\lambda, \phi, t) \cong c_h(\lambda, \phi, t) = \sum_{j=1}^{N_h} c_j(t) \cdot \varphi_j(\lambda, \phi) \quad (4.1)$$

y llamando  $V_h$  el subespacio de  $V$  de dimensión  $N < +\infty$  generado por las  $N_h$  funciones base  $\varphi_j(\lambda, \phi)$  de  $V_h$ .

Intuitivamente la idea central es remitirnos a un método muy tradicional de resolución analítica de ecuaciones diferenciales parciales llamada separación de variables, donde asumimos la solución como un producto de funciones independientes en las variables temporal y espacial. En el método de Galerkin también se tiene esta separación no de la solución, sino más bien del espacio en que buscamos esta solución (algo muy similar al intentar descomponer  $V$  como una suma directa de subespacios convenientes, solo que aquí la descomposición no es una suma directa).

La opción para la presente aproximación son los triángulos de primer orden en el dominio; esto generalmente significa que el dominio discretizado  $\Omega_h$  ya no coincide con el original pero lo aproxima en el sentido de que cuando los

tamaños de los triángulos más grandes en cada discretización van a cero, el dominio discretizado tiende al original. No obstante mantendremos la misma identificación, es decir  $\Omega$ , sin la pérdida de información.

Reescribiendo (3.4) para las funciones aproximadas dadas en (4.1), resulta en ecuaciones válidas para cualquier función en el ahora subespacio finito-dimensional. Lo que sugiere verificar el sistema únicamente para los elementos de la base del espacio finito-dimensional. Por consiguiente, lo que tenemos es equivalente al sistema discreto dado, para  $t \in (0, T]$ , por:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\partial c_h}{\partial t} |v \right)_{0,\Omega} + \alpha \left[ \left( \frac{1}{\cos^2 \phi} \frac{\partial c_h}{\partial \lambda} \frac{\partial v}{\partial \lambda} \right)_{0,\Omega} + \left( \frac{\partial c_h}{\partial \phi} \frac{\partial v}{\partial \lambda} \right)_{0,\Omega} \right] \\ & + v_1 \left( \frac{1}{\cos \phi} \frac{\partial c_h}{\partial \lambda} |v \right)_{0,\Omega} + v_2 \left( \frac{\partial c_h}{\partial \phi} |v \right)_{0,\Omega} + \sigma (c_h |v)_{0,\Omega} + k_2 \langle c_h |v \rangle_{\Gamma_2} \\ & = k_2 \langle c_e |v \rangle_{\Gamma_2} - k_1 \langle g |v \rangle_{\Gamma_1} + (\mathcal{F} |v)_{0,\Omega}, \quad \forall v \in V_h \end{aligned} \quad (4.2)$$

que nos lleva al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias discretizado:

$$\left\{ \begin{aligned} & \left( \sum_{j=1}^{N_h} \frac{dc_j}{dt} \varphi_j |v \right)_{0,\Omega} + \alpha \left[ \left( \frac{1}{\cos^2 \phi} \sum_{j=1}^{N_h} c_j \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \frac{\partial v}{\partial \lambda} \right)_{0,\Omega} + \left( \sum_{j=1}^{N_h} c_j \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \frac{\partial v}{\partial \lambda} \right)_{0,\Omega} \right] \\ & + v_1 \left( \frac{1}{\cos \phi} \sum_{j=1}^{N_h} c_j \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} |v \right)_{0,\Omega} + v_2 \left( \sum_{j=1}^{N_h} c_j \frac{\partial \varphi_j}{\partial \phi} |v \right)_{0,\Omega} + \sigma \left( \sum_{j=1}^{N_h} c_j \varphi_j |v \right)_{0,\Omega} \\ & + k_2 \left\langle \sum_{j \in \Gamma_2} c_j \varphi_j |v \right\rangle_{\Gamma_2} = k_2 \langle c_e |v \rangle_{\Gamma_2} - k_1 \langle g |v \rangle_{\Gamma_1} + (\mathcal{F} |v)_{0,\Omega}, \quad \forall v \in V_h \end{aligned} \right.$$

como los coeficientes  $c_j = c_j(t)$  no dependen de  $\lambda$  ni de  $\phi$  pueden salir de los productos internos, que están definidos solo para las variables espaciales, así:

$$\left\{ \begin{aligned} & \sum_{j=1}^{N_h} \frac{dc_j}{dt} (\varphi_j |v)_{0,\Omega} + \alpha \left[ \sum_{j=1}^{N_h} c_j \left( \frac{1}{\cos^2 \phi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \frac{\partial v}{\partial \lambda} \right)_{0,\Omega} + \sum_{j=1}^{N_h} c_j \left( \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \frac{\partial v}{\partial \lambda} \right)_{0,\Omega} \right] \\ & + v_1 \sum_{j=1}^{N_h} c_j \left( \frac{1}{\cos \phi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} |v \right)_{0,\Omega} + v_2 \sum_{j=1}^{N_h} c_j \left( \frac{\partial \varphi_j}{\partial \phi} |v \right)_{0,\Omega} + \sigma \sum_{j=1}^{N_h} c_j (\varphi_j |v)_{0,\Omega} \\ & + k_2 \sum_{j \in \Gamma_2} c_j \langle \varphi_j |v \rangle_{\Gamma_2} = k_2 \langle c_e |v \rangle_{\Gamma_2} - k_1 \langle g |v \rangle_{\Gamma_1} + (\mathcal{F} |v)_{0,\Omega}, \quad \forall v \in V_h \end{aligned} \right. \quad (4.3)$$

Ahora, escribir la ecuación (4.3) para todo  $v \in V_h$ , equivale a escribirla para los elementos de la base. Por lo tanto tenemos:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{N_h} \left\{ \frac{dc_j}{dt} (\varphi_j | \varphi_i) + c_j \left[ \alpha \left( \left( \frac{1}{\cos^2 \phi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \middle| \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda} \right) + \left( \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \middle| \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda} \right) \right) + \right. \\ & v_1 \left( \frac{1}{\cos \phi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \middle| \varphi_i \right) + v_2 \left( \frac{\partial \varphi_j}{\partial \phi} \middle| \varphi_i \right) + \sigma (\varphi_j | \varphi_i)_\Omega \left. \right\} + k_2 \sum_{j \in \Gamma_2} c_j \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle_{\Gamma_2} \\ & = k_2 \langle c_e | \varphi_i \rangle_{\Gamma_2} - k_1 \langle g | \varphi_i \rangle_{\Gamma_1} + (\mathcal{F} | \varphi_i) \quad \forall \varphi_j \in V_h \end{aligned} \quad (4.4)$$

En la ecuación anterior, las expresiones en las sumas, las cuales se refieren a los productos internos sobre la parte de las fronteras, en realidad indican que los únicos índices considerados serán aquellos que yacen sobre dichas partes de la frontera. La ecuación (4.4) describe, un sistema lineal de ecuaciones diferenciales ordinarias.

La ecuación (4.4) será ahora aproximada en su variable temporal usando el esquema de Crank-Nicolson con diferencias centradas de segundo orden, para el cual usaremos las aproximaciones dadas por (4.5) y (4.6). Los subíndices  $i$  y  $j$  se refieren a la discretización del dominio espacial, donde  $c_{ij}$  es la concentración en el nodo  $(\lambda_i, \phi_j) \in \Omega$ .

$$\frac{d}{dt} c_{ij} \left( t_n + \frac{\Delta t}{2} \right) \approx \frac{c_{ij}(t_{n+1}) - c_{ij}(t_n)}{\Delta t}, \quad (4.5)$$

$$c_{ij} \left( t_n + \frac{\Delta t}{2} \right) \approx \frac{c_{ij}^{(n+1)} + c_{ij}^{(n)}}{2}. \quad (4.6)$$

Reescribiendo (4.4) para las funciones aproximadas dadas en (4.5–4.6), resulta un sistema de ecuaciones lineales algebraico, para  $t_n \in (0, T]$  de  $c(t_n)$ , de donde obtenemos el sistema lineal discretizado:

$$\begin{aligned} & \sum_j \{ c_j^{n+1} \left[ \left( 1 + \sigma \frac{\Delta t}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) + \alpha \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{1}{\cos^2 \phi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \middle| \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda} \right) + \alpha \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \middle| \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda} \right) \right. \\ & \quad \left. + v_1 \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{1}{\cos \phi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \middle| \varphi_i \right) + v_2 \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{\partial \varphi_j}{\partial \phi} \middle| \varphi_i \right) + k_2 \frac{\Delta t}{2} \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle_{j \in \Gamma_2} \right\} \\ & = \sum_j \{ c_j^n \left[ \left( 1 - \sigma \frac{\Delta t}{2} \right) (\varphi_j | \varphi_i) - \alpha \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{1}{\cos^2 \phi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \middle| \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda} \right) - \alpha \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \middle| \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda} \right) \right. \\ & \quad \left. - v_1 \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{1}{\cos \phi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \middle| \varphi_i \right) - v_2 \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{\partial \varphi_j}{\partial \phi} \middle| \varphi_i \right) - k_2 \frac{\Delta t}{2} \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle_{j \in \Gamma_2} \right\} \\ & \quad - k_1 \Delta t \langle g | \varphi_i \rangle_{\Gamma_1} + k_2 \Delta t \langle c_e | \varphi_i \rangle_{\Gamma_2} + \Delta t (\mathcal{F} | \varphi_i) \quad \forall \varphi_i \in (V_h) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Podemos representar el sistema discretizado 4.7 en la forma matricial por:

$$Ac^{(n+1)} = Bc^{(n)} + d, \quad (4.8)$$

donde

$$\begin{aligned}
 a_{ij} &= \left(1 + \sigma \frac{\Delta t}{2}\right) (\varphi_j | \varphi_i) + \alpha \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{1}{\cos^2 \phi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \Big| \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda}\right) + \alpha \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial \phi} \Big| \frac{\partial \varphi_i}{\partial \phi}\right) \\
 &\quad + v_1 \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{1}{\cos \phi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} | \varphi_i\right) + v_2 \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial \phi} | \varphi_i\right) + k_2 \frac{\Delta t}{2} \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle_{j \in \Gamma_2} \\
 b_{ij} &= \left(1 - \sigma \frac{\Delta t}{2}\right) (\varphi_j | \varphi_i) - \alpha \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{1}{\cos^2 \phi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \Big| \frac{\partial \varphi_i}{\partial \lambda}\right) - \alpha \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} \Big| \frac{\partial \varphi_i}{\partial \phi}\right) \\
 &\quad - v_1 \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{1}{\cos \phi} \frac{\partial \varphi_j}{\partial \lambda} | \varphi_i\right) - v_2 \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial \phi} | \varphi_i\right) - k_2 \frac{\Delta t}{2} \langle \varphi_j | \varphi_i \rangle_{j \in \Gamma_2} \\
 d_i &= -k_1 \Delta t \langle g | \varphi_i \rangle_{\Gamma_1} + k_2 \Delta t \langle c_e | \varphi_i \rangle_{\Gamma_2} + \Delta t (\mathcal{F} | \varphi_i) \\
 &\quad i = 1, 2, \dots, N_h
 \end{aligned}$$

La matriz  $A$  en la ecuación (4.8) se llama *matriz de rigidez* y el vector resultante de la operación  $Bc^{(n)} + d$  para cada instante  $t_n + \frac{\Delta t}{2}$  se denomina el *vector de carga*.

La escogencia de las funciones prueba  $\varphi_i$  se hará usando elementos finitos triangulares de primer orden, lo cual consiste en construir una malla de elementos finitos sobre un dominio  $\Omega$  y escoger las funciones base  $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{N_h}\}$  definidas globalmente como de tipo lineal por partes y satisfaciendo la siguiente condición:

$$\varphi_i(\lambda_j, \phi_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j, \end{cases}$$

donde  $(\lambda_j, \phi_j)$  son las coordenadas del  $j$ -ésimo nodo en la malla.

De esta forma se obtiene una función pirámide por cada nodo, que es lineal por partes, asumiendo el valor de 1 en el  $j$ -ésimo nodo y 0 en los demás.

### 5. Resultados obtenidos

Presentaremos algunos resultados de simulaciones realizadas con un código numérico desarrollado en el software MATLAB<sup>®</sup>, con animaciones que pueden describir el proceso evolutivo del contaminante en el dominio discretizado, en un intervalo de tiempo previamente escogido, donde la principal característica es la visualización a través de gráficos que facilitan su comprensión.

**5.1. Simulaciones de escenarios.** Los parámetros fueron estimados dentro de los aspectos considerados razonables para la simulación de escenarios y pruebas del modelo desarrollado.

Las simulaciones de los escenarios fueron obtenidas considerando la discretización del dominio para algunos tipos de situaciones: bajas velocidades para el campo  $\vec{V}$  y diferentes permeabilidades en la frontera. Se hicieron los gráficos presentados en las simulaciones para los instantes de tiempo  $t = 0$ ,

$t = 12$ ,  $t = 24$  y  $t = 40$  horas, para los escenarios de las figuras 2, 4 y 6, respectivamente.

Los parámetros usados para obtener los resultados en el escenario 1 (Figuras 2 y 3) son presentados en la tabla 1, donde hemos considerado una baja difusión, corrientes marinas débiles en la dirección de SO a NE; así tenemos  $V_1 = V \cos \frac{\pi}{4}$  y  $V_2 = V \sin \frac{\pi}{4}$  donde  $V$  es la magnitud de la velocidad de las corrientes marinas. Además suponemos que después de la descarga de contaminante en la parte central del dominio, la fuente de contaminante continúa actuando en esa parte del dominio

Parámetros del modelo	Valores	Unidades	Parámetros de Discretización	Valores
$\alpha$	0.0001	$km^2/h$		
$\sigma$	0.001	$h^{-1}$		
$V_1$	$0.008 \cos(\pi/4)$	$km/h$	$\Delta\lambda$	$0.0087km$
$V_2$	$0.008 \sin(\pi/4)$	$km/h$	$\Delta\phi$	$0.0087km$
$k_1$	0.00001	$ppm/kmh$	$\Delta t$	$0.0200horas$
$k_2$	0.00001	$ppm/kmh$		
$c_e$	0.0001	$ppm/h$		
$\mathcal{F}$	0.1	$ppm/h$		

TABLA 1. Parámetros para la Simulación 1

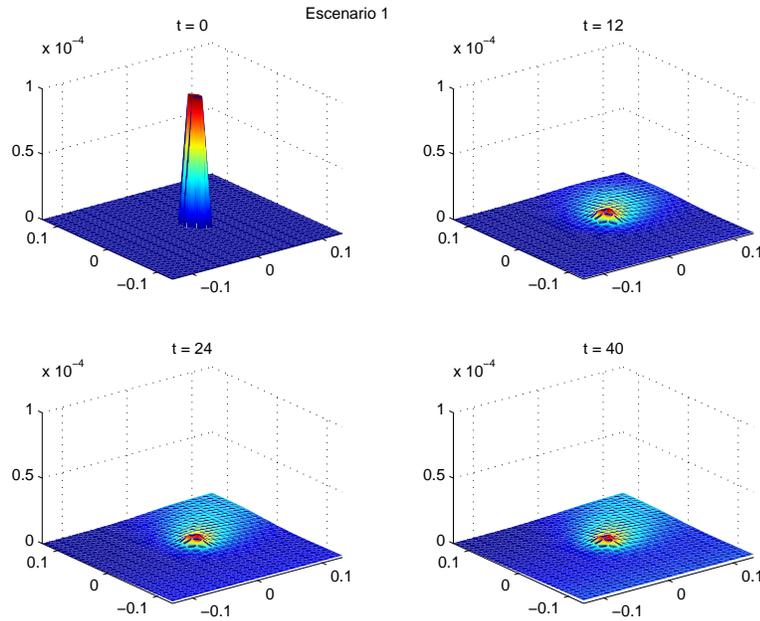


FIGURA 2. Simulación del escenario 1

A continuación, presentamos un segundo escenario donde se han considerado igualmente una difusión baja, vientos débiles en la dirección de NO a SE, sin fuente en el centro. Los parámetros usados para obtener los resultados de este escenario (Figuras 4 y 5) son los mismos presentados en la tabla 1, excepto  $k_2 = c_e = \mathcal{F} = 0$ ,  $V_1 = 0.008 \cos(-\pi/4)$  y  $V_2 = 0.008 \sin(-\pi/4)$ .

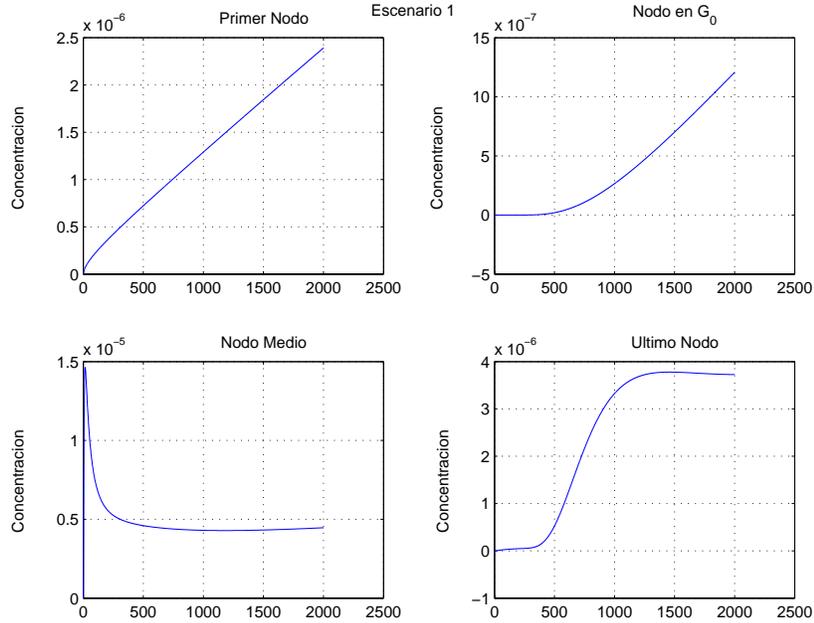


FIGURA 3. Comportamiento en los nodos a lo largo del tiempo-escenario 1

Finalmente, los parámetros de los resultados presentados en el escenario 3 (Figuras 6 y 7) son los mismos mostrados en la tabla 1, cuyas condiciones difieren de las simulaciones previas en relación a la dirección del campo de velocidades que suponemos de SE a NO, en otros términos,  $V_1 = 0.008 \cos \frac{3\pi}{4}$ , y  $V_2 = 0.008 \text{sen} \frac{3\pi}{4}$ . Además en este caso los valores para la permeabilidad  $k_1$  y  $k_2$  son nulos, y suponemos que el valor de la fuente es dado por  $\mathcal{F} = 0.0001 \exp(-0.001) \text{ ppm/h}$ .

Comparando los resultados presentados en los tres escenarios, podemos notar una distribución diferente para la concentración de contaminantes en el dominio, donde el proceso de derramamiento fue gobernado por el campo de velocidades como lo supusimos.

Los resultados muestran compatibilidad con lo esperado en tales situaciones, a pesar de las limitaciones impuestas por el método escogido para hacer las simulaciones de escenarios, es decir, la inestabilidad numérica del método para situaciones de advección dominante, en los casos en que la condición de Peclet

(BROOKS & HUGHES, 1982; HEINRICH *et al.*, 1977; CHISTIE *et al.*, 1976) no se cumple. Esta condición está dada por:

$$\frac{V_i \Delta x_i}{\alpha} \leq 2$$

donde  $V_i$  es la componente del término advectivo  $V$  en la dirección  $x_i$ ,  $\Delta x_i$  es la longitud máxima del intervalo en la dirección  $x_i$  y  $\alpha$  es el coeficiente de difusión global.

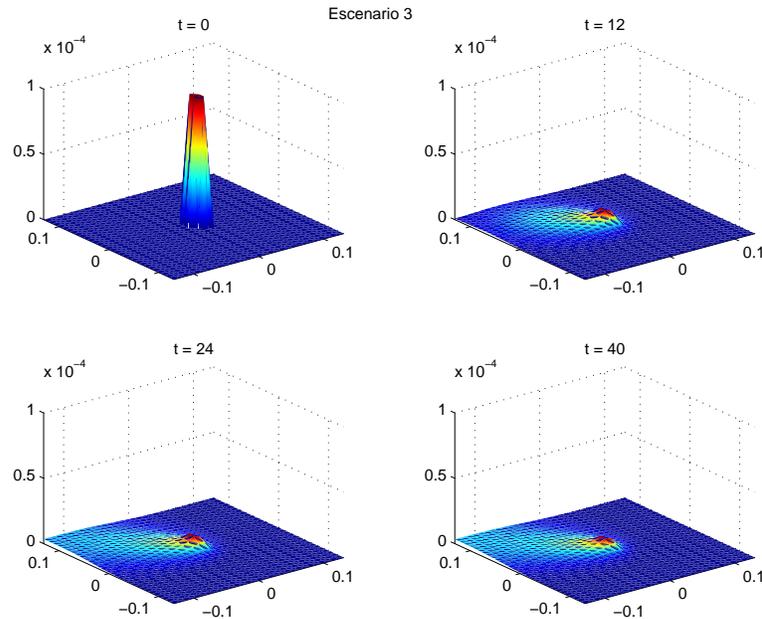


FIGURA 4. Simulación del escenario 3

## 6. Conclusiones

Aunque las simulaciones presentadas no han sido comparadas con derrames reales, debido a que no se cuenta con datos confiables de corrientes, vientos, difusión, o derrames de los sitios donde pueda llegar a tener aplicación este trabajo, lo que podría llegar a ser una gran desventaja en el mismo, pensamos que este trabajo puede llegar a ser una valiosa herramienta teórica para el trabajo futuro de otros, ampliándolo o mejorándolo y hasta también llegar a ser utilizada satisfactoriamente cuando se presente una situación real.

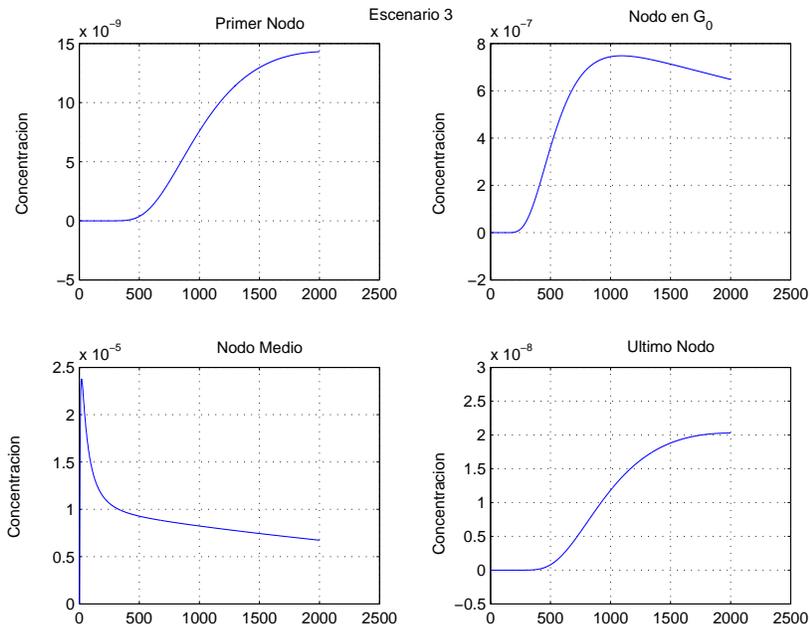


FIGURA 5. Comportamiento de los nodos a lo largo del tiempo–escenario 3

**Agradecimientos:** La primera autora quiere expresar aquí sus más sinceros agradecimientos a los profesores de la Universidad del Quindío que de alguna u otra manera supieron brindarle valiosas contribuciones para la realización de este trabajo, especialmente a DUMAR VILLA, HERNANDO HURTADO, PAULO CÉSAR CARMONA e IRENE DUARTE. Así como también a la Directora de la Maestría en Biomatemáticas, MARÍA DOLLY GARCÍA por su colaboración y gestión durante el proceso. A COLCIENCIAS por su contribución financiera, crucial para la culminación de este trabajo.

### Bibliografía

- [1] R. C. BASSANEZI, *Ensino–aprendizagem com modelagem matemática*. Ed. Contexto: S. Paulo, 2002.
- [2] A. BRESSAN, *Hiperbolic System of Conservation Laws*, Vol. 20 of Oxford Lecture Series in Mathematics and its Applications. Oxford University Press: Oxford, 2000.
- [3] A. N. BROOKS & T. J. R. HUGHES, *Streamline upwind /Petrov–Galerkin formulations for convection dominated flows whit particular emphasis on incompressible Navier–Stokes equations*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering **32** (1982), 199–259.
- [4] L. CHISTIE, D. GRIFFITHS, A. R. MITCHELL, & O. C. ZIENKIEWICZ, *Finite elements methods for second order diferencial equations whit significant first derivatives*. International Journal for Numerical Methods in Engineering **10** (1976), 1389–1396.
- [5] P. G. CIARLET, *The finite element for elliptic problems*. North–Holland: Amsterdam (1987).

- [6] G. L. DINIZ, *Dispersion of pollutant in an air–water system modelling, approximation and applications*. Ph. D. Thesis, Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computacao UNICAMP, Campinas, Brasil, 2003.
- [7] G. L. DINIZ & J. F. C. A. MEYER, *Pollutant dispersal on stuary sistem: study and mathematical modeling*, In Proceedings of the 4th Brazilian Symposium on Mathematical and Computational Biology, vol. II (2005), 333–346.
- [8] EDELSTEIN & KESHET, *Mathenatical Models in Biology*. Random–House: New York (1988).
- [9] J. C. HEINRICH, P. S. HUYAKORN, A. R. MITCHELL, & O. C. ZIENKIEWICZ, *An upwind finite elements sheme for two-dimensional convective transport equation*. International Journal for Numerical Methods in Engineering **11** (1977), 131–143.
- [10] J. L. LIONS, *Equations Differentelles Opérationelles*. Springer: New York, 1961.
- [11] G. I. MARCHUK, *Mathematical models in environmental problems*. Vol. 16 of Studies in Mathematical and its Applications. North–Holland: Amsterdam, 1986.
- [12] R. M. MÉNDEZ , *Extensión de un modelo de difusión de partículas contaminantes a superficies esféricas*. Tesis de Maestría. Uniquindío: Armenia, Quindío, Colombia, 2005.
- [13] J. F. C. A. MEYER, *Modelos matemáticos de impacto ambiental –uma visao introdutória*. Relatório de Pesquisa. Instituto de Matemática e Computação Científica, UNICAMP: Campinas, Brasil, 1988.
- [14] J. F. C. A. MEYER & G. L. DINIZ, *Pollutant dispersion in wetland system mathematical modeling and numerical simulation*. Ecological Modelling (submitted –to appear), (2006).
- [15] A. OKUBO, *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models*. Springer: New York, 1980.
- [16] C. SILVA, C. BOIA, J. VALENTE, C. BORREGO, *Pesticides in Esteros del Ibera (AR): evaluation of impacts and proposal of guidelines for water quality protection*. Ecological Modelling **186** (1)(2005), 85–97.
- [17] S. SIMONIT, F. CATTANEO & C. PERRINGS, *Modelling the hidrologycal externalities of agriculture in wetlands: the case of rice in Esteros del Ibera, Argentina*. Ecological Modelling **186** (1)(2005), 123–141.
- [18] P. WEIDEMAIER, *Existence results in  $L^p - L^q$  spaces for second order parabolic equations with inhomogeneous Dirichlet boundary conditions*. In: Progress in Partial differential equations. Longman: Harlow, 1998, 189–200.
- [19] WIKIMEDIA, *Green ´s identities* , in: *Webpage of Wikipedia - The Free Encyclopedia*. En [http://en.wikipedia.org/wiki/Green ´s\\_identities](http://en.wikipedia.org/wiki/Green%27s_identities); acceso en 22/04/2006.
- [20] F. ZINGALES, A. MARANI, A. RINALDO & G. BENDORICCHIO, *A conceptual model of unitmass response function for nonpoint source pollutant runoff*. Ecological Modelling **26** (1984), 285–311.

(Recibido en abril de 2006. Aceptado para publicación en diciembre de 2006)

DEPARTAMENTO OF MATEMÁTICAS  
UNIVERSIDAD DEL QUINDÍO  
ARMENIA, COLOMBIA  
e-mail: [aliciarb@uniquindio.edu.co](mailto:aliciarb@uniquindio.edu.co)