

Solución numérica de la ecuación de difusión-advección-reacción con un esquema de separación de operadores

David Parra Guevara

Centro de Ciencias de la Atmósfera
Universidad Nacional Autónoma de México
Circuito Exterior, C. U.
México D.F.
04510 México
pdavid@atmosfera.unam.mx

Resumen

Se presenta un esquema de separación de operadores componente-por-componente absolutamente estable de orden dos simétrico para resolver la ecuación de difusión-advección-reacción lineal bidimensional. Se muestra que el modelo discreto en diferencias finitas es convergente y que su realización se reduce a resolver una sucesión de sistemas lineales tridiagonales. Al final del trabajo se prueba que el esquema propuesto es consistente con una ecuación de balance de masa. Estas características hacen que el esquema numérico sea de fácil implementación y consistente con el fenómeno de transporte.

1. Introducción

La ecuación de difusión-advección-reacción aparece en el estudio de la propagación de sustancias contaminantes en diferentes medios. La solución de dicha ecuación representa la concentración de la sustancia que se dispersa y es una información muy importante en el estudio de diversos problemas de interés ecológico como son: estimación del impacto ambiental por derrames de petróleo [9], ubicación óptima de nuevas

plantas industriales [3], determinación del sitio de una explosión nuclear [7] y control de emisiones industriales [5,6]. Debido a la complejidad de estos problemas no es posible en general obtener una solución analítica para la ecuación de difusión-advención-reacción, por lo que es necesario usar técnicas numéricas para hallar una solución aproximada. Dentro de los métodos numéricos para tratar esta ecuación destacan aquellos que generan esquemas discretos que satisfacen una ecuación de balance de masa similar a la del problema continuo, y cuya implementación computacional sea eficiente y sencilla. La primera característica es indispensable para mantener el sentido físico del modelo, mientras que las restantes se requieren para resolver problemas de gran escala que involucran regiones en la atmósfera o el océano donde se observan procesos de dispersión de sustancias, en estos casos el esfuerzo computacional se debe reducir con el fin de hacer predicciones en un tiempo razonable. Los métodos de separación de operadores son especialmente útiles en estos casos, ya que se han desarrollado para reducir problemas complejos de la física matemática a una cadena de problemas más simples los cuales pueden ser eficientemente resueltos en una computadora [2,4]. Este tipo de reducción consiste en separar al operador que caracteriza la ecuación de estudio como una suma de operadores de estructura más simple. Es importante observar que los métodos de separación de operadores permiten la discretización de la variable temporal en el modelo continuo, mientras que la discretización de las variables espaciales se realiza con técnicas de diferencias finitas o elemento finito. Por lo tanto, lo que permite que el modelo discreto conserve las propiedades físicas del modelo continuo es una adecuada combinación de discretizaciones en espacio y tiempo.

En lo que sigue se considera un modelo general de dispersión (bidimensional) el cual se resuelve con un esquema numérico de orden dos basado en diferencias finitas centradas sobre una malla doble tipo-C de Arakawa y la técnica de separación de operadores componente-por-componente.

Sea $D \subset \mathbb{R}^2$ un dominio acotado simplemente conexo, con frontera S , el cual contiene todas las fuentes de emisión de una especie contaminante. Se denota con $\phi(\mathbf{r}, t)$ a la concentración de la sustancia en el punto $\mathbf{r} \in D$ y al tiempo $t > 0$. Al realizar un balance de masa de dicha sustancia en D es posible establecer el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales parciales que modelan la dispersión del contaminante

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) = f(\mathbf{r}, t) \quad \text{en } D \times (0, T), \quad (1)$$

$$\phi(\mathbf{r}, 0) = \phi^0(\mathbf{r}) \quad \text{en } D, \quad (2)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} - U_n \phi = 0 \quad \text{en } S^-, \quad (3)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{en } S^+, \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad \text{en } D. \quad (5)$$

Donde $\mathbf{U} = \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$, en la ecuación de difusión-advección-reacción (1), denota la velocidad del campo advectivo (viento, corrientes marinas, etc.) que es responsable del transporte de la sustancia en D , y para el cual se asume que se cumple la ecuación de continuidad (5) o condición de incompresibilidad. $\sigma = \sigma(\mathbf{r}, t) > 0$ y $\mu = \mu(\mathbf{r}, t) > 0$ son los coeficientes de transformación química de la especie contaminante y difusión turbulenta, respectivamente, y $f(\mathbf{r}, t)$ es el forzamiento determinado por las fuentes de emisión del contaminante. Cuando las fuentes de emisión son puntuales dicho forzamiento toma la forma

$$f(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i),$$

donde Q_i es la tasa de emisión no-estacionaria que presenta la fuente ubicada en el sitio $\mathbf{r}_i \in D$.

La frontera S se ha dividido en dos partes dependiendo de si el flujo entra a D o sale, es decir, S^+ se define como los puntos de S tal que $U_n = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} \geq 0$, donde \mathbf{n} es el vector normal exterior, y S^- se define como el complemento ($U_n = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} < 0$). La condición de frontera (3) establece que en S^- no hay salida o entrada de la especie contaminante y la condición de frontera (4) desprecia el flujo difusivo turbulento en comparación con el flujo advectivo, y por lo tanto, la salida de la especie contaminante sólo es por advección. Estas condiciones de frontera tienen un adecuado sentido físico y hacen que el problema (1)-(5) este bien formulado en el sentido de Hadamard, es decir, la solución del modelo es única y depende continuamente de los datos [8]. Estas propiedades son consecuencia directa de que el operador

$$A\phi = \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi),$$

con las condiciones (3) y (4) es positivo, es decir, $(A\phi, \phi)_{L_2(\bar{D})} > 0$.

Finalmente, la ecuación (2) define a ϕ^0 como la distribución espacial de la especie contaminante al tiempo $t = 0$ sobre D .

2. Esquema de Crank-Nicholson

Una idea central en el esquema de separación de operadores componente-por-componente es el esquema de Crank-Nicholson el cual permite discretizar el modelo respecto del tiempo. Para presentar este esquema es posible considerar el siguiente problema de evolución general que contiene como caso particular al modelo de dispersión (1)-(5)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + A\phi = f, \quad (6)$$

$$\phi(0) = \phi^0. \quad (7)$$

Se asume que ϕ^0 y f son funciones suficientemente suaves con el fin de que la solución ϕ tenga derivadas continuas respecto del tiempo y pueda aproximarse con polinomios de Taylor. Además, se considera que el operador diferencial denotado por A ya se ha discretizado en espacio usando alguna técnica de diferencias finitas de tal forma que se tiene una matriz positiva-semidefinida. Por lo tanto, en el proceso de discretización total del modelo, sólo falta la aproximación temporal.

Se considera una malla en el eje del tiempo con tamaño de paso $\tau > 0$ y nodos $t_k = k\tau$, $k = 0, 1 \dots M$; $T = M \cdot \tau$. Desarrollando a ϕ en un polinomio de Taylor de orden dos centrado en $t_{k+\frac{1}{2}}$ se tiene que

$$\phi(t_{k+1}) = \phi(t_{k+\frac{1}{2}}) + \frac{\tau}{2}\phi'(t_{k+\frac{1}{2}}) + \left(\frac{\tau}{2}\right)^2 \frac{\phi''(t_{k+\frac{1}{2}})}{2!} + \left(\frac{\tau}{2}\right)^3 \frac{\phi'''(\xi)}{3!}, \quad y$$

$$\phi(t_k) = \phi(t_{k+\frac{1}{2}}) - \frac{\tau}{2}\phi'(t_{k+\frac{1}{2}}) + \left(\frac{\tau}{2}\right)^2 \frac{\phi''(t_{k+\frac{1}{2}})}{2!} - \left(\frac{\tau}{2}\right)^3 \frac{\phi'''(\eta)}{3!}.$$

Combinando estas expresiones se obtienen las siguientes fórmulas de diferencias finitas de orden dos:

$$\frac{\phi(t_{k+1}) - \phi(t_k)}{\tau} = \phi'(t_{k+\frac{1}{2}}) + o(\tau^2),$$

$$\frac{\phi(t_{k+1}) + \phi(t_k)}{2} = \phi(t_{k+\frac{1}{2}}) + o(\tau^2).$$

Aplicando estas fórmulas en (6) y despreciando el error de truncamiento, es decir, los términos $o(\tau^2)$, se obtiene el modelo discreto de segundo orden llamado *esquema de Crank-Nicholson*:

$$\frac{\phi^{k+1} - \phi^k}{\tau} + A^k \frac{\phi^{k+1} + \phi^k}{2} = f^{k+\frac{1}{2}},$$

donde ϕ^k denota la aproximación de, por lo menos, segundo orden para $\phi(t_k)$, $f^{k+\frac{1}{2}} = f(t_{k+\frac{1}{2}})$ y $A^k = A(t_{k+\frac{1}{2}})$.

Agrupando términos en la última ecuación se tiene que

$$\begin{aligned} (I + \frac{\tau}{2}A^k)\phi^{k+1} &= (I - \frac{\tau}{2}A^k)\phi^k + \tau f^{k+\frac{1}{2}}, \quad k = 0 \dots M-1, \\ \phi^0 &= \phi(0), \end{aligned} \quad (8)$$

por lo cual se concluye que el esquema es implícito. Es importante notar que para calcular la aproximación de ϕ en cada nivel de tiempo es necesario resolver un sistema lineal de ecuaciones algebraicas donde la matriz del sistema $(I + \frac{\tau}{2}A^k)$ es definida positiva (no singular), y por lo tanto, la solución existe de forma única. Esta característica es esencial y se repite en los métodos de separación de operadores que se exponen más adelante.

El esquema definido por (8) es estable respecto de pequeñas perturbaciones en la condición inicial y el forzamiento. Para mostrar esto se considera el siguiente resultado sobre la estimación de la norma [4].

Teorema 2.1. *Sea A una matriz $N \times N$ positiva-semidefinida y $\sigma \geq 0$, entonces se tiene que*

- (i) $\|(I - \sigma A)(I + \sigma A)^{-1}\|_2 \leq 1$, (*Lema de Kellogg*), y
- (ii) $\|(I + \sigma A)^{-1}\|_2 \leq 1$.

El esquema de aproximación numérica definido por (8) se puede escribir como

$$\phi^{k+1} = T^k \phi^k + \tau S^k f^{k+\frac{1}{2}}, \quad (9)$$

donde $T^k = (I + \frac{\tau}{2}A^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}A^k)$ y $S^k = (I + \frac{\tau}{2}A^k)^{-1}$.

Tomando la norma sobre (9) se tiene

$$\|\phi^{k+1}\|_2 \leq \|T^k\|_2 \|\phi^k\|_2 + \tau \|S^k\|_2 \|f^{k+\frac{1}{2}}\|_2,$$

aplicando el Teorema 2.1, definiendo $\|f\| = \max_j \|f^j\|_2$, y observando que

$$(I + \frac{\tau}{2}A^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}A^k) = (I - \frac{\tau}{2}A^k)(I + \frac{\tau}{2}A^k)^{-1},$$

se obtiene que

$$\|\phi^{k+1}\|_2 \leq \|\phi^k\|_2 + \tau \|f\|.$$

Finalmente, es posible escribir

$$\|\phi^k\|_2 \leq \|\phi^0\|_2 + k\tau \|f\|, \quad \text{con } k\tau \leq T.$$

Ya que (9) es un proceso lineal, entonces, de la última acotación, se concluye que $\forall \tau > 0$ y $T < \infty$ las perturbaciones de ϕ son pequeñas cuando las perturbaciones del forzamiento y la condición inicial también son pequeñas (estabilidad incondicional).

Según el Teorema de Convergencia de Lax [4], un esquema de aproximación numérica que presenta estabilidad, y cuyo error de truncamiento es al menos $o(\tau)$ (consistencia), es convergente. Es decir, cuando Δx , Δy y $\tau \rightarrow 0$ se tiene que

$$|\phi_{ij}^k - \phi(\mathbf{r}_{ij}, t_k)| \rightarrow 0.$$

Ya que el esquema de Crank-Nicholson presenta estabilidad incondicional y un error de truncamiento $o(\tau^2)$ se concluye que es convergente.

Las características de este esquema de solución numérica indican que este método es una buena técnica para resolver el modelo de dispersión (1)-(5), sin embargo, se requiere de un gran esfuerzo computacional para realizar (8), ya que la dimensión de la matriz A es igual al número de nodos considerados en la discretización del dominio D , que en general es un número grande, y por lo tanto, se complica la solución del sistema algebraico. Cuando se aplican diferencias finitas centradas de segundo orden en la discretización del operador diferencial sobre D , se obtiene que la matriz A es tridiagonal por bloques, y cada bloque es a su vez una matriz tridiagonal, esta estructura y la dimensión de A es lo que implica un alto tiempo de cómputo para obtener la solución de los sistemas algebraicos en (8). La alternativa a esta dificultad computacional es un esquema de separación de operadores.

3. Separación de operadores componente por componente

Algunos problemas de la física matemática pueden ser reducidos a una cadena de problemas más simples los cuales son resueltos en forma eficiente por computadora. Este tipo de reducción es posible en los casos donde el operador positivo semidefinido, que caracteriza al modelo, es descompuesto en la suma de operadores positivos semidefinidos con estructura simple [2,4]. Tales métodos son conocidos como *métodos de separación de operadores*, siendo uno de los más importantes el esquema de separación *componente-por-componente* que se describe a continuación.

Se considera la ecuación de evolución general (6) en forma homogénea, y se supone que el operador diferencial A fue aproximado

por diferencias finitas en espacio de tal forma que se tiene una matriz positiva-semidefinida. Además, se supone que A se puede descomponer en dos matrices positivas-semidefinidas A_1 y A_2 de tal forma que

$$A = A_1 + A_2.$$

Las matrices A_1 y A_2 se aproximan de la siguiente forma

$$\Lambda_\alpha^k = A_\alpha(t_{k+\frac{1}{2}}), \quad \text{en } t_k \leq t \leq t_{k+1}, \quad \alpha = 1, 2;$$

donde se está considerando una malla en el tiempo similar a la de la sección anterior.

Se considera el siguiente esquema de solución numérica, el cual es una aplicación sucesiva del esquema de Crank-Nicholson para los operadores A_1 y A_2 ,

$$\frac{\phi^{k+\frac{1}{2}} - \phi^k}{\tau} + \Lambda_1^k \frac{\phi^{k+\frac{1}{2}} + \phi^k}{2} = 0, \quad (10)$$

$$\frac{\phi^{k+1} - \phi^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} + \Lambda_2^k \frac{\phi^{k+1} + \phi^{k+\frac{1}{2}}}{2} = 0. \quad (11)$$

Combinando (10) y (11) para eliminar $\phi^{k+\frac{1}{2}}$ se obtiene

$$\phi^{k+1} = T^k \phi^k,$$

donde

$$T^k = (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)(I + \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k).$$

Ya que $\|T^k\|_2 \leq 1$ (Teorema 2.1), se tiene que el esquema (10)-(11) es absolutamente estable, (se debe observar que $(I + \frac{\tau}{2}\Lambda_\alpha^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}\Lambda_\alpha^k) = (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_\alpha^k)(I + \frac{\tau}{2}\Lambda_\alpha^k)^{-1}$, $\alpha = 1, 2$) Para demostrar que el esquema también es consistente es necesario considerar el siguiente teorema [1].

Teorema 3.1. *Sea T una matriz real $N \times N$ tal que $\|T\| < 1$, entonces*

- (i) $I - T$ es no singular,
- (ii) $(I - T)^{-1} = I + T + T^2 + \dots + T^m + \dots$, y
- (iii) $\|(I - T)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|T\|}$.

Para τ suficientemente pequeño se cumple que $\frac{\tau}{2}\|\Lambda_1^k\|_2 < \frac{1}{2}$ y $\frac{\tau}{2}\|\Lambda_2^k\|_2 < \frac{1}{2}$, y por el Teorema 3.1 es posible escribir

$$T^k = I - \tau\Lambda^k + \frac{\tau^2}{2}[(\Lambda_1^k)^2 + 2\Lambda_2^k\Lambda_1^k + (\Lambda_2^k)^2] - \dots,$$

si además $\Lambda_1^k \Lambda_2^k = \Lambda_2^k \Lambda_1^k$, entonces se obtiene que

$$T^k = I - \tau \Lambda^k + \frac{\tau^2}{2} (\Lambda^k)^2 - \dots.$$

La última ecuación muestra que el esquema (10)-(11) coincide con el esquema (8) hasta orden dos, y por lo tanto, se concluye que (10)-(11) es consistente. De nuevo, el Teorema de Lax implica la convergencia del esquema.

La ventaja obtenida con esta separación de operadores es que la realización computacional del esquema (10)-(11) es más sencilla que la de (8), siempre y cuando A_1 y A_2 representen la descomposición del operador A en las direcciones x y y respectivamente. Esto se debe a que las fórmulas (10)-(11) implican la solución sucesiva de problemas unidimensionales con una estructura simple, es decir, sistemas algebraicos donde la matriz es tridiagonal de bajo orden, y por lo tanto, de fácil solución.

La desventaja del esquema (10)-(11) es que se necesita que los operadores Λ_1^k y Λ_2^k conmuten, lo cual no se tiene en general. Cuando los operadores no conmutan la aproximación sólo es de primer orden. Por este motivo se propone un esquema más general.

Se aproximan A_1 y A_2 en el tiempo como

$$\Lambda_\alpha^k = A_\alpha(t_k), \quad \text{en } t_{k-1} \leq t \leq t_{k+1},$$

y se considera el nuevo esquema simétrico:

$$\frac{\phi^{k-\frac{1}{2}} - \phi^{k-1}}{\tau} + \Lambda_1^k \frac{\phi^{k-\frac{1}{2}} + \phi^{k-1}}{2} = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\phi^k - \phi^{k-\frac{1}{2}}}{\tau} + \Lambda_2^k \frac{\phi^k + \phi^{k-\frac{1}{2}}}{2} = 0, \quad (13)$$

$$\frac{\phi^{k+\frac{1}{2}} - \phi^k}{\tau} + \Lambda_2^k \frac{\phi^{k+\frac{1}{2}} + \phi^k}{2} = 0, \quad (14)$$

$$\frac{\phi^{k+1} - \phi^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} + \Lambda_1^k \frac{\phi^{k+1} + \phi^{k+\frac{1}{2}}}{2} = 0. \quad (15)$$

Al combinar estas ecuaciones para eliminar $\phi^{k-\frac{1}{2}}$, ϕ^k y $\phi^{k+\frac{1}{2}}$, se puede escribir

$$\phi^{k+1} = T^k \phi^{k-1},$$

donde

$$T^k = (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_1^k)^{-1} (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_1^k) (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_2^k)^{-1} (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_2^k) \times$$

$$\times (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)(I + \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k).$$

Desarrollando en serie de potencias a la matriz T^k (Teorema 3.1), se tiene

$$T^k = I - 2\tau A^k + \frac{(2\tau)^2}{2}(A^k)^2 - \dots,$$

donde $A^k = A(t_k)$. Esta última ecuación implica que el esquema (12)-(15) coincide hasta orden dos con el esquema de Crank-Nicholson aplicado a (6) en el intervalo $t_{k-1} \leq t \leq t_{k+1}$,

$$\frac{\phi^{k+1} - \phi^{k-1}}{2\tau} + A^k \frac{\phi^{k+1} + \phi^{k-1}}{2} = 0.$$

Se concluye que el esquema (12)-(15) es absolutamente estable (por el Teorema 2.1 $\|T^k\|_2 \leq 1$), y de orden dos de aproximación, independientemente de que las matrices Λ_1^k y Λ_2^k conmuten o no. El Teorema de Lax garantiza la convergencia.

Para el caso no-homogéneo del problema general (6)-(7) el esquema de solución numérica anterior se generaliza con las siguientes ecuaciones

$$\left\{ \begin{array}{l} (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)\phi^{k-\frac{1}{2}} = (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)\phi^{k-1}, \\ (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)(\phi^k - \tau f^k) = (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)\phi^{k-\frac{1}{2}}, \\ (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)\phi^{k+\frac{1}{2}} = (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)(\phi^k + \tau f^k), \\ (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)\phi^{k+1} = (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)\phi^{k+\frac{1}{2}}. \end{array} \right. \quad (16)$$

donde $f^k = f(t_k)$.

4. Separación de operadores en la ecuación de difusión-advección-reacción

Para aplicar el esquema (16) al modelo de dispersión (1)-(5) se definen A_1 y A_2 como sigue:

$$A_1\phi = \frac{1}{2}\sigma\phi + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u\phi) + \frac{1}{2}u\frac{\partial\phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial\phi}{\partial x}\right), \quad y$$

$$A_2\phi = \frac{1}{2}\sigma\phi + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial y}(v\phi) + \frac{1}{2}v\frac{\partial\phi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial\phi}{\partial y}\right).$$

De esta forma el fenómeno se ha separado en las direcciones x y y respectivamente.

Si se considera que $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$ se prueba que $A = A_1 + A_2$, donde A es el operador diferencial positivo

$$A\phi = \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi.$$

Hay que observar que existen otras formas de elegir A_1 y A_2 para la separación por componentes, sin embargo, la que se propone arriba es simétrica, lo cual permite el mismo tratamiento numérico para ambos operadores. Además, estos operadores son positivos semidefinidos, lo cual es una característica necesaria para aplicar el esquema (16) que no todas las descomposiciones presentan.

Para mostrar que cada uno de estos operadores es positivo semidefinido, se considera, sin pérdida de generalidad, que el dominio D es el rectángulo $[0, X] \times [0, Y]$. Se tiene entonces que

$$\int_0^X \phi A_1 \phi dx = \frac{1}{2} \int_0^X \sigma \phi^2 dx + \int_0^X \mu \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 dx + \left[\frac{1}{2} \phi^2 u - \mu \phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_0^X.$$

Aplicando las condiciones de frontera (3)-(4) en $x = 0$ y $x = X$, es posible escribir el último término como

$$\left[\frac{1}{2} \phi^2 u - \mu \phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_0^X = \frac{1}{2} [\phi^2(X) \cdot |u(X)| + \phi^2(0) \cdot |u(0)|] \geq 0.$$

Ya que los parámetros σ y μ son no negativos se concluye que

$$(A_1 \phi, \phi)_{L_2(\bar{D})} = \int_0^Y \int_0^X \phi A_1 \phi dx dy \geq 0.$$

Un cálculo similar prueba que A_2 también es un operador positivo semidefinido.

Es importante notar que el argumento anterior sigue siendo válido para cualquier región D (conexa y simplemente conexa) que es, o se aproxima por, un número finito de rectángulos.

El esquema de solución numérica (16) requiere que la discretización de las variables espaciales de cada operador diferencial preserve la propiedad anterior, es decir, las matrices A_1 y A_2 deben ser también positivas semidefinidas. Para lograr ésto, se discretiza en espacio usando diferencias finitas centradas de orden dos sobre una malla doble (tipo-C) de Arakawa. Las fórmulas de aproximación para cada término del operador A_1 son:

$$\left(\frac{1}{2} \sigma \phi \right)_{ij} = \frac{1}{2} \sigma_{ij} \phi_{ij}, \quad (17)$$

$$\left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u\phi) + \frac{1}{2}u\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{ij} \cong \frac{u_{i+\frac{1}{2}j}\phi_{i+1j} - u_{i-\frac{1}{2}j}\phi_{i-1j}}{2\Delta x}, \quad (18)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)\right)_{ij} \cong \mu\frac{\phi_{i+1j} - 2\phi_{ij} + \phi_{i-1j}}{\Delta x^2}, \quad (19)$$

donde $\Delta x > 0$ es el tamaño de paso para la discretización en la dirección x . Para discretizar el operador A_2 se usan fórmulas similares en la dirección y .

Las ecuaciones (17) y (19) son aproximaciones bien conocidas de orden dos, sin embargo, la fórmula (18) necesita una explicación; para ésto, se debe observar que

$$\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u\phi) + \frac{1}{2}u\frac{\partial\phi}{\partial x} = u\frac{\partial\phi}{\partial x} + \frac{1}{2}\phi\frac{\partial u}{\partial x}.$$

Al aproximar cada factor del lado derecho con una diferencia finita centrada de orden dos, o un promedio centrado de orden dos, se obtiene que

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u\phi) + \frac{1}{2}u\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{ij} &= \frac{u_{i+\frac{1}{2}j} + u_{i-\frac{1}{2}j}}{2} \cdot \frac{\phi_{i+1j} - \phi_{i-1j}}{2\Delta x} + \\ &+ \frac{\phi_{i+1j} + \phi_{i-1j}}{2} \cdot \frac{u_{i+\frac{1}{2}j} - u_{i-\frac{1}{2}j}}{2\Delta x}. \end{aligned}$$

Simplificando la última expresión se obtiene (18).

Para mostrar que los correspondientes operadores discretos son positivos semidefinidos, se debe observar que

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N (A_1\phi_{ij})\phi_{ij} &= \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_{ij}}{2}\phi_{ij}^2 + \frac{\mu}{\Delta x^2} \sum_{i=1}^{N-1} (\phi_{ij} - \phi_{i+1j})^2 + \frac{\mu}{\Delta x^2} (\phi_{1j}^2 + \phi_{Nj}^2) + \\ &+ \frac{1}{2\Delta x} \left(u_{N+\frac{1}{2}j} \phi_{Nj} \phi_{N+1j} - u_{\frac{1}{2}j} \phi_{0j} \phi_{1j} \right) - \frac{\mu}{\Delta x^2} (\phi_{Nj} \phi_{N+1j} + \phi_{0j} \phi_{1j}) .. \end{aligned}$$

Aplicando los cuatro casos discretos de las condiciones de frontera (3)-(4) en $x = 0$ y $x = X$, es posible reescribir los últimos términos para obtener

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N (A_1\phi_{ij})\phi_{ij} &= \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_{ij}}{2}\phi_{ij}^2 + \frac{\mu}{\Delta x^2} \sum_{i=1}^{N-1} (\phi_{ij} - \phi_{i+1j})^2 + \\ &+ \frac{1}{2\Delta x} \left(\left| u_{N+\frac{1}{2}j} \right| \phi_{Nj}^2 + \left| u_{\frac{1}{2}j} \right| \phi_{1j}^2 \right). \end{aligned}$$

Ya que cada término en la última ecuación es no negativo, sumando sobre j , se concluye que

$$(A_1\phi, \phi) = \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N (A_1\phi_{ij}) \phi_{ij} \geq 0,$$

donde $\phi \in \mathbb{R}^{N+M}$ y satisface las condiciones de frontera discretas (3)-(4).

En forma similar se prueba que la matriz A_2 es positiva-semidefinida, y por lo tanto, la matriz A cumple también con esta propiedad ($A = A_1 + A_2$).

Dadas las características de los operadores A_1 y A_2 antes descritas es posible aplicar el esquema de solución numérica (16) al modelo de dispersión (1)-(5). La realización de este esquema implica, con la discretización antes formulada, la solución sucesiva de sistemas lineales tridiagonales; ésto se debe a que hay que resolver problemas unidimensionales en las direcciones x y y (desacoplados), los cuales se discretizaron con fórmulas de diferencias finitas centradas con tres puntos. Existen varios métodos para resolver estos sistemas tridiagonales, entre los posibles métodos directos está el de factorización, el cual es computacionalmente económico ya que es rápido y requiere poca memoria. En lo que sigue se describe dicho algoritmo.

Se considera el siguiente sistema tridiagonal de $l + 1$ ecuaciones con $l + 1$ incógnitas:

$$\begin{aligned} a_i\varphi_{i-1} - b_i\varphi_i + c_i\varphi_{i+1} &= f_i, \quad i = 1..l - 1, \\ \varphi_0 &= \alpha_0\varphi_1 + \beta_0, \\ \varphi_l &= \alpha_l\varphi_{l-1} + \beta_l, \end{aligned}$$

donde la matriz del sistema se supone definida positiva, y por lo tanto, el sistema tiene solución única. La solución se puede obtener con el siguiente esquema.

Algoritmo de factorización

1) *Sustitución hacia adelante.*

Calcular para $k = 1 \dots l - 1$

$$\alpha_k = \frac{c_k}{b_k - a_k\alpha_{k-1}} \quad \text{y} \quad \beta_k = \frac{a_k\beta_{k-1} - f_k}{b_k - a_k\alpha_{k-1}}.$$

2) *Tomar*

$$\varphi_l = \frac{\alpha_l \beta_{l-1} + \beta_l}{1 - \alpha_l \alpha_{l-1}} \dots$$

3) *Sustitución hacia atrás.*

Calcular para $k = l - 1 \dots 0$

$$\varphi_k = \alpha_k \varphi_{k+1} + \beta_k \dots$$

Para verificar el correcto desempeño del esquema (16) con este algoritmo de factorización es posible comparar la predicción numérica de la concentración promedio de ϕ con el valor exacto que se obtiene de la ecuación de balance de masa

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi \, d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^N Q_i(t) - \int_D \sigma \phi \, d\mathbf{r} - \int_{S^+} \phi U_n \, dS \dots$$

Para usar esta ecuación como un estimador se considera $\sigma = 0$ y $\phi = 0$ sobre S para $0 \leq t \leq T$, de esta forma, al integrar se obtiene

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{D,T}(\phi) &= \frac{1}{|D| \cdot T} \int_0^T \int_D \phi(\mathbf{r}, \zeta) \, d\mathbf{r} \, d\zeta = \frac{1}{|D| \cdot T} \sum_{i=1}^N \int_0^T \int_0^\zeta Q_i(t) \, dt \, d\zeta + \\ &+ \frac{1}{|D|} \int_D \phi^0(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r}. \end{aligned}$$

Si $\phi^0 = 0$, y las tasas de emisión son constantes, entonces la ecuación anterior se reduce y toma la forma

$$\mathbf{J}_{D,T}(\phi) = \frac{T}{2 \cdot |D|} \sum_{i=1}^N Q_i,$$

y en el caso $Q_i = a_i t$ se obtiene

$$\mathbf{J}_{D,T}(\phi) = \frac{T^2}{6 \cdot |D|} \sum_{i=1}^N a_i.$$

A continuación se consideran tres ejemplos donde se aplican las dos últimas ecuaciones en la siguiente forma, los lados izquierdos se evaluaron a través del esquema numérico, y los lados derechos (E) se calcularon en forma exacta. Los parámetros para dichos ejemplos están contenidos en la Tabla 5.1 y los parámetros de discretización, con el tiempo de cómputo (T_c), en la Tabla 5.2.

Tabla 5.1

Ej.	u	v	μ	Q_1	Q_2	\mathbf{r}_1	\mathbf{r}_2	X	Y
1	$-0,75x$	$0,75y$	0,04	3,8	0,0	(1,5, 0,5)	(0,0, 0,0)	2	2
2	$-0,5x$	$0,5y$	0,04	3,8	1,5	(1,5, 0,5)	(0,8, 0,8)	2	2
3	1,5	$0,84x$	0,8	10^4t	$5 \cdot 10^3t$	(1,5, 1,6)	(1,0, 1,6)	4	4

Tabla 5.2

Ej.	N_x	M_y	Δt	N_t	T	T_c	$ D $	$\mathbf{J}_{D,T}$	E
1	50	50	0,02	50	1,0	101''	4,0	0,4749	0,4750
2	50	50	0,02	50	1,0	102''	4,0	0,6624	0,6625
3	30	30	0,004	100	0,4	79''	16,0	24,9998	25,0000

Al comparar las últimas dos columnas de la Tabla 5.2 se comprueba que el esquema propuesto, y los programas correspondientes, son correctos. Además, estos resultados numéricos sugieren que se satisfacen la ecuación de balance de masa discreta. Para demostrar esta propiedad se debe observar que

$$\frac{1}{2\Delta x} \sum_{i=1}^N \left(u_{i+\frac{1}{2}j} \phi_{i+1j} - u_{i-\frac{1}{2}j} \phi_{i-1j} \right) = \frac{1}{\Delta x} \left(u_{N+\frac{1}{2}j} \phi_{N+\frac{1}{2}j} - u_{\frac{1}{2}j} \phi_{\frac{1}{2}j} \right) +$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \phi_{ij} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2}j} - u_{i-\frac{1}{2}j}}{\Delta x} \right).$$

Con esta ecuación y las condiciones de frontera (3) y (4) en su forma discreta es posible probar que

$$\sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N A_1 \phi_{ij} = \sum_{i,j} \frac{\sigma_{ij}}{2} \phi_{ij} + \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=1}^M \left(\delta_{N+\frac{1}{2}j} |u_{N+\frac{1}{2}j}| \phi_{N+\frac{1}{2}j} + \delta_{\frac{1}{2}j} |u_{\frac{1}{2}j}| \phi_{\frac{1}{2}j} \right) +$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi_{ij} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2}j} - u_{i-\frac{1}{2}j}}{\Delta x} \right),$$

donde

$$\delta_{N+\frac{1}{2}j} = \begin{cases} 1, & \text{si } u_{N+\frac{1}{2}j} \geq 0, \\ 0, & \text{si } u_{N+\frac{1}{2}j} < 0. \end{cases}, \text{ y } \delta_{\frac{1}{2}j} = \begin{cases} 0, & \text{si } u_{\frac{1}{2}j} \geq 0, \\ 1, & \text{si } u_{\frac{1}{2}j} < 0. \end{cases}.$$

En forma análoga se tiene

$$\sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N A_2 \phi_{ij} = \sum_{i,j} \frac{\sigma_{ij}}{2} \phi_{ij} + \frac{1}{\Delta y} \sum_{i=1}^N \left(\delta_{iM+\frac{1}{2}} |v_{iM+\frac{1}{2}}| \phi_{iM+\frac{1}{2}} + \delta_{i\frac{1}{2}} |v_{i\frac{1}{2}}| \phi_{i\frac{1}{2}} \right) +$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi_{i,j} \left(\frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right).$$

Si se considera que

$$0 = (\nabla \cdot \mathbf{U})_{ij} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y},$$

entonces es posible escribir

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N A \phi_{ij} &= \sum_{i,j} \sigma_{i,j} \phi_{i,j} + \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=1}^M \left(\delta_{N+\frac{1}{2},j} \left| u_{N+\frac{1}{2},j} \right| \phi_{N+\frac{1}{2},j} + \delta_{\frac{1}{2},j} \left| u_{\frac{1}{2},j} \right| \phi_{\frac{1}{2},j} \right) + \\ &+ \frac{1}{\Delta y} \sum_{i=1}^N \left(\delta_{iM+\frac{1}{2}} \left| v_{iM+\frac{1}{2}} \right| \phi_{iM+\frac{1}{2}} + \delta_{i\frac{1}{2}} \left| v_{i\frac{1}{2}} \right| \phi_{i\frac{1}{2}} \right), \end{aligned}$$

donde los últimos dos términos determinan el flujo de masa a través de la frontera S y se denotan por Ψ .

Por otra parte, el esquema numérico (16) representa, hasta orden dos, la realización del método de Crank-Nicholson en el intervalo $t_{k-1} \leq t \leq t_{k+1}$, es decir,

$$\frac{\phi_{ij}^{k+1} - \phi_{ij}^{k-1}}{2\tau} + A^k \frac{\phi_{ij}^{k+1} + \phi_{ij}^{k-1}}{2} = f_{ij}^k.$$

Sumando sobre j e i en esta ecuación se tiene la ecuación de balance de masa discreta

$$\frac{1}{2\tau} \left(\sum_{i,j} \phi_{ij}^{k+1} - \sum_{i,j} \phi_{ij}^{k-1} \right) = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \sum_l Q_l^k - \sum_{i,j} \sigma_{i,j}^k \phi_{i,j}^k - \Psi^k,$$

la cual indica que la variación de la masa en un intervalo de longitud 2τ es igual a la masa que ingresa a D por las fuentes puntuales, menos la pérdida de masa por los siguientes fenómenos: transformación química y flujo a través de la frontera. Esto significa que la ecuación discreta coincide (hasta orden dos) con la ecuación de balance de masa continua.

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por el proyecto PAPIIT IN122401 (UNAM) y el SNI (México).

Referencias

- [1] Burden, R.L. and Faires, J.D., Numerical Analysis, Brooks Cole, 1998.
- [2] Douglas, J., Kellogg, R. B., and Varga, R. S., *Alternating direction methods for n space variables*, Math. Comput, **17** (1963), 83.
- [3] Marchuk G. I., Mathematical models in environmental problems, Elsevier, New York, 1986.
- [4] Marchuk, G. I., Methods of numerical mathematics, Springer-Verlag, NY, 1975.
- [5] Parra-Guevara D. and Yu.N. Skiba, Elements of the mathematical modeling in the control of pollutants emissions. Ecological Modelling, Elsevier, **167** (3), (2003), 263–275.
- [6] Parra-Guevara, D. and Yuri N. Skiba, *Industrial pollution transport*. Part II: Control of industrial emissions, Env. Modeling and Assessment, Baltzer, **5** (3), (2000), 177–184.
- [7] Pudykiewicz J., *Application of adjoint tracer transport equations for evaluating source parameters*, Atmospheric Environment, **32** (17), (1998), 3039–3050.
- [8] Skiba Yu. N. and Parra-Guevara D., *Industrial pollution transport*. Part I: Formulation of the problem and air pollution estimates. Env. Modeling and Assessment, Baltzer, **5**, (3), (2000), 169–175.
- [9] Skiba Y.N., *Dual oil concentration estimates in ecologically sensitive zones*, Environmental Monitoring and Assessment, **43** (1996), (1996), 139–151.