

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE CIENCIAS MARINAS



**“DISPERSIÓN DE PARTÍCULAS EN PRESENCIA
DE UN CAMPO DE VELOCIDADES
DETERMINISTA CONSTITUIDO POR UN VÓRTICE”**



T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
O C E A N Ó L O G O

PRESENTA:

LUIS JAVIER PLATA ROSAS

ENSENADA, B C., SEPTIEMBRE DE 1996.

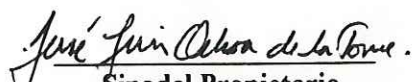
**“DISPERSIÓN DE PARTÍCULAS EN PRESENCIA
DE UN CAMPO DE VELOCIDADES
DETERMINISTA CONSTITUIDO POR UN VÓRTICE”**

T E S I S
QUE PRESENTA:
Luis Javier Plata Rosas

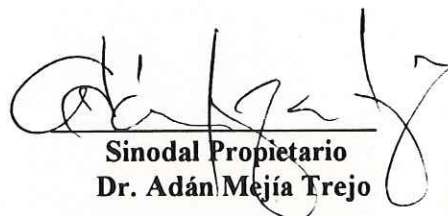
Aprobada por:



Presidente del Jurado
Dr. Federico Graef Ziehl



Sinodal Propietario
Dr. José Luis Ochoa de la Torre



Sinodal Propietario
Dr. Adán Mejía Trejo

RESUMEN

La dispersión de n partículas (n suficientemente grande para permitir la descripción del proceso estadísticamente) fue modelada por medio de la integración numérica de una ecuación de tipo Langevin. La técnica de caminata aleatoria se utilizó para obtener la posición de las partículas en cada paso de tiempo y los momentos estadísticos (media y desviación estándar) que describen el desarrollo en el tiempo del proceso. Se eligió a la difusión molecular como la parte estocástica de la dispersión; la componente determinista fue generada por un vórtice: a) rotacional, b) irrotacional, y c) de Rankine. La dominancia de una componente sobre la otra resultó ser una función de: i) la distancia a la que se encontraba una cierta partícula con respecto al centro del vórtice; y ii) el mayor orden de magnitud de una constituyente con respecto a la otra. Para cada tipo de vórtice se determinó el radio a partir del cual dominaba una de las componentes (y, por consiguiente, la zona en que la difusión molecular, o la presencia del vórtice, era la principal responsable de la dispersión) sobre la otra. La media fluctuó, como era de esperarse teóricamente, alrededor del valor de la posición inicial de las partículas. La desviación estándar estimada se comportó prácticamente igual que la teórica cuando el efecto del vórtice era casi nulo. Tanto la media como la desviación estándar, en los vórtices irrotacional y de Rankine, tendieron a alcanzar un equilibrio al dominar el efecto del vórtice. La difusión molecular fue la causa principal de una mejor dispersión (esto a partir de los valores de la desviación estándar), comparada con aquella en la que domina el efecto del vórtice. Se obtuvo también una mejor dispersión en presencia de un vórtice irrotacional, con respecto a la originada por los vórtices rotacional y de Rankine. Finalmente, cuando la posición inicial de las partículas coincidía con la del centro del vórtice, la presencia del vórtice rotacional no afectó a la dispersión.

DEDICATORIA

A mis padres,

Luis Javier Plata y Concepción Rosas Serrano

—quienes me han dedicado no una tesis, sino toda una vida—,

con admiración, gratitud, veneración, ... en definitiva,

con amor.

A Liza Danielle,

con indescriptible cariño.

Gracias por enriquecer mi vida de forma

tan trascendente.

AGRADECIMIENTOS

El primer principio de los deberes del hombre hacia sí mismo queda expresado en esta sentencia: vive conforme a tu naturaleza —naturae convenienter vive—; el segundo en la proposición: hazte más perfecto de lo que la naturaleza te ha creado —perfice te ut finem, perfice te ut medium—.

Kant

Al Dr. Federico Graef Ziehl, por ser él quien propuso el tema de estudio, además de dirigirme durante más de un año en un servicio social, dos congresos y la presente tesis. Su apoyo incondicional y todo el tiempo que dedicó a la dirección, revisión y corrección de este trabajo son invaluable y, desafortunadamente, nunca podrán ser suficientemente retribuidos.

Al Dr. José Luis Ochoa, por el interés que mostró de principio a fin en la investigación del tema. Gracias en especial por sus certeras observaciones y sugerencias, las cuales llegaron siempre en el momento más oportuno y necesario.

Al Dr. Adán Mejía, quien dió a nosotros, sus alumnos, la confianza necesaria para originar una sempiterna amistad.

A Eva, segunda mujer que me ha tenido más tiempo entre sus brazos. Inútil tratar de mencionar aquí todo lo que le debo.

A Aída, Rosa Isela, Luz Elena, Carlos, Roberto y a toda la familia García Jara, quienes me han alojado y auxiliado desde que llegué a Ensenada.

A Lorena, por más de diez años de amistad ininterrumpida. A María de Lourdes, por su total confianza y entrega en nuestra amistad. A Ana Laura, a quien no puedo —ni quiero— omitir en esta lista —y mucho menos en esta vida—.

A Bernardo y Vicente, amigos inseparables y sobrevivientes del *Grupo de los 7*. Ellos han hecho lo imposible por demostrar que diferencias ideológicas y ausencias prolongadas no representan obstáculo significativo para proseguir con nuestra amistad.

A Gina, Brenda, Laura, Luty y Beatriz. Aunque nada puede suplir su ausencia, sus cartas fueron refugio y fuente de ánimo, son objeto de recuerdo y nostalgia, y serán monumentos de amistad y esperanza.

A Juan Carlos, Cuauhtémoc, Diego, Chema y Gerardo, todos ellos amigos admirables y personas íntegras de quienes espero haber aprendido algo de su tenacidad, iniciativa, coraje, escepticismo y paciencia, respectivamente.

A Flor, por su cariño; a Berenice, por sus críticas; a Katia, por su apoyo. Y por más de cuatro años de convivencia, anécdotas y detalles que conservo entre lo mejor que me ha sucedido hasta ahora, gracias a: César García, mi pariente Luis Guzmán, Raquel, Érika, Cecilia, Yadira, Jocelyn, Natalie, René, Jesús, Gilberto, Héctor, Neza, Diego, Daniel, Óscar y Gerardo.

Al Q.F.B. Misael González Ibarra, por darme una primera experiencia laboral inolvidable. Cathy, Karina, Tere, Carmelita, Jesús, Alfonso y Manuel, tienen por siempre mi reconocimiento y gratitud.

A la UABC y en especial a la Facultad de Ciencias Marinas.

Al CICESE, por proporcionar la infraestructura necesaria para llevar a cabo este trabajo.

A todos mis maestros.

ÍNDICE

	<i>Pág.</i>
Resumen	i
Dedicatoria	ii
Agradecimientos	iii
Índice	v
Notación	vii
Lista de tablas	ix
Lista de figuras	ix
I. Introducción	1
II. Objetivo general	3
II.1. Objetivos particulares	3
III. Teoría	4
III. 1. Difusión molecular y movimiento browniano	4
III. 1. 1. Concentración y flujo de materia	4
III. 1. 2. Leyes de Fick	5
III. 1. 3. Solución de la ecuación de difusión con condiciones iniciales y de frontera específicas	8
III. 2. Caminata aleatoria	9
III. 3. Ecuación de Langevin	14
III. 4. Vorticidad	16
III. 4. 1. Vórtice rotacional	16
III. 4. 2. Vórtice irrotacional	18
III. 4. 3. Vórtice de Rankine	19
IV. Método	21
IV. 1. Modelo de dispersión	21

IV. 2. Solución numérica del modelo de dispersión	25
IV. 2. 1. Vórtice rotacional	25
IV. 2. 2. Vórtice irrotacional	27
IV. 2. 3. Vórtice de Rankine	28
V. Resultados y discusiones	29
V. 1. Análisis del comportamiento físico de la dispersión de partículas en vórtices	29
V. 2. Evaluación de la eficacia de la técnica de caminata aleatoria y de la ecuación de tipo Langevin para modelar dispersión de partículas en vórtices	52
V. 3. Evaluación de la eficacia de los esquemas numéricos utilizados	52
VI. Conclusiones	55
VII. Literatura citada	56

NOTACIÓN

A continuación se presenta una lista de las variables y símbolos utilizados en este trabajo:

Γ	circulación;
D	coeficiente de difusión molecular;
β	coeficiente de viscosidad del fluido en que se encuentra la sustancia difusiva;
Z	combinaciones posibles de n elementos tomados de r en r ;
u_r, u_θ	componentes de velocidad (en coordenadas polares) radial y tangencial del fluido;
u, v	componentes de velocidad (en coordenadas cartesianas) del fluido;
C	concentración de sustancia que se difunde (sustancia difusiva);
γ	constante de integración;
C	curva cerrada que acota a la superficie S ;
a	distancia promedio entre las moléculas (partículas);
ΔA	elemento de área;
$d\vec{r}$	elemento de línea tangente a la curva C ;
λ	factor de amplificación;
f_{ua}	factor de velocidad aleatoria;
$\vec{F}$	flujo difusivo;
$\vec{E}$	fuerza estocástica que actúa sobre las partículas;
N	iteración, instante de tiempo para el que se calcula la posición de toda partícula;
l_m	longitud de mezcla;

m	masa de una partícula;
M	masa total de sustancia difusiva;
n	número total de partículas;
∇	operador gradiente;
∇^2	operador laplaciano;
q	posición de la partícula con respecto al origen de la dispersión;
X	posición de la partícula, expresada utilizando variable compleja;
$P_N(q)$	probabilidad de que una partícula se halle a q pasos del origen después de N iteraciones;
r	radio al que se encuentra localizada una partícula difusiva en cierta iteración N ;
r_n	radio de una nube de partículas;
R	radio a partir del cual el comportamiento del flujo en un vórtice de Rankine cambia de rotacional ($r < R$) a irrotacional ($r > R$);
R_{lim}	radio a partir del cual una componente de velocidad (aleatoria o determinista) domina sobre la otra;
S	superficie que encierra a un volumen de control ΔV ;
t	tiempo;
$\vec{n}$	vector normal al área ΔA ;
Ω	velocidad angular;
$\vec{u}_a$	velocidad estocástica de la partícula;
$\vec{u}_d$	velocidad determinista de la partícula;
U_a	velocidad de la partícula, expresada utilizando variable compleja;
ΔV	volumen de control;
$\vec{\omega}$	vorticidad.

LISTA DE TABLAS

	<i>Pág.</i>
Tabla I. Caminata aleatoria en una dimensión. Probabilidad de que una partícula se encuentre ubicada a q pasos del origen después de N iteraciones aleatorias	11
Tabla II. Dispersión de partículas en presencia de un vórtice. Experimentos numéricos realizados	29

LISTA DE FIGURAS

Fig. 1. Elemento de fluido de forma tetrahédrica (Tomado de Csanady, 1980)	6
Fig. 2. Campo de velocidades generado por un vórtice rotacional. La longitud de cada vector de velocidad es directamente proporcional a la intensidad del mismo	17
Fig. 3. Como en Fig. 2, pero en el caso de un vórtice irrotacional	18
Fig. 4. Como en Fig. 2, pero en el caso de un vórtice de Rankine	20
Fig. 5. Distribución de probabilidad de la velocidad aleatoria	23
Fig. 6. Dispersión de partículas en un vórtice rotacional con condición inicial Ia (ver sección VI), $f_{ua} = 0.1$ y $\Omega = 1$. Se muestran las posiciones de todas las n partículas ($n = 1000$) para ciertas iteraciones N	32
Fig. 7. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice rotacional con condición inicial Ib, $f_{ua} = 0.1$ y $\Omega = 1$	33

Fig. 8. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice rotacional con condición inicial IIa, $f_{ua} = 0.1$ y $\Omega = 1$	34
---	----

Fig. 9. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice rotacional con condición inicial IIb, $f_{ua} = 1$ y $\Omega = 1$	35
---	----

Fig. 10. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice irrotacional con condición inicial Ib, $f_{ua} = 1$ y $\Gamma = 1$	37
---	----

Fig. 11. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice irrotacional con condición inicial IIa, $f_{ua} = 0.1$ y $\Gamma = 1$	38
--	----

Fig. 12. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice irrotacional con condición inicial IIb, $f_{ua} = 0.1$ y $\Gamma = 1$	39
--	----

Fig. 13. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice de Rankine con condición inicial Ia, $f_{ua} = 0.1$ y $\Omega = 1$	41
---	----

Fig. 14. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice de Rankine con condición inicial IIb, $f_{ua} = 0.1$ y $\Omega = 1$	42
--	----

Fig. 15. Media y desviación estándar de cada serie de simulaciones de dispersión de partículas con condición inicial Ia (ver sección VI) y f_{ua} igual a: a) 0.1; b) 1.0; y c) 10.0. Cada gráfica muestra el comportamiento de la media o de la desviación estándar correspondientes a un vórtice: rotacional (línea magenta); irrotacional (línea verde); de Rankine (línea azul); y el comportamiento teórico de la desviación estándar si sólo hay difusión molecular (línea negra)	45
---	----

Fig. 16. Como en Fig. 15, pero en el caso de dispersión de partículas con condición inicial Ib	46
--	----

Fig. 17. Como en Fig. 15, pero en el caso de dispersión de partículas con
condición inicial IIa 47

Fig. 18. Como en Fig. 15, pero en el caso de dispersión de partículas con
condición inicial IIb 48

Fig. 19. Gradiente de concentración exhibido, para cada número N de
iteraciones, durante un proceso de dispersión de partículas en un vórtice rotacional
con $\Omega = 1$ y condición inicial Ia. Las flechas indican la dirección del gradiente;
la intensidad del color es directamente proporcional a la concentración de partículas 50

Fig. 20. Como en Fig. 19, pero en el caso de un vórtice irrotacional con $\Gamma = 1$
y condición inicial Ib 51

I. INTRODUCCIÓN

La descripción de fenómenos de *dispersión de material* (disuelto o particulado) presente en el medio marino constituye un problema de interés científico, económico, político y ecológico, susceptible de ser clasificado dentro de uno o más de estos aspectos en función de las condiciones involucradas, en especial de la naturaleza del material que se dispersa (contaminantes, sedimentos, nutrientes, plancton, etc.).

Los procesos dispersivos están constituidos por: a) una componente determinista, es decir, una componente cuyo comportamiento es perfectamente predecible, lo que no necesariamente significa que la ecuación que describe este comportamiento tenga una solución exacta (*i.e.*, una solución analítica), y b) una componente estocástica que ocasiona que la dispersión, en la mayoría de los casos, sólo pueda ser modelada numéricamente. En este trabajo fueron seleccionadas la vorticidad y la difusión molecular como constituyentes determinista y aleatoria, respectivamente, del proceso dispersivo.

La *difusión molecular* es el proceso por el cual las impurezas presentes (disueltas o particuladas) en un fluido, sea éste un gas o un líquido en reposo, se mezclan con el medio circundante como consecuencia de una agitación molecular (Crank, 1975).

En ocasiones se establece la diferencia entre el concepto de difusión y el de *movimiento browniano*: la primera se tiene cuando la masa de las moléculas de la sustancia disuelta o particulada, a la que se conoce como *sustancia difusiva*, es similar al de aquellas del fluido en que se encuentran; por otro lado, cuando la masa de las moléculas de la sustancia difusiva es mucho más grande que la masa de las moléculas del fluido circundante, se trata de un movimiento browniano. Dado que la única diferencia perceptible entre ambos casos está en la razón de mezcla (Csanady, 1980), y que el movimiento browniano tiene un comportamiento difusivo para la escala de tiempo del modelo de dispersión diseñado en este trabajo, es correcto referirse a ambos fenómenos simplemente como *difusión molecular*. El énfasis en el adjetivo *molecular* tiene por objeto distinguir este proceso de aquel, más eficiente, debido a movimientos en escala

macroscópica causados a su vez por la presencia de un campo de velocidades turbulento (Kundu, 1990) y conocido como difusión turbulenta, que no fue objeto de estudio en esta tesis.

La descripción fenomenológica de la difusión molecular puede hacerse mediante tres tratamientos distintos (Braun, 1984): a) por medio de la ecuación de Langevin, b) utilizando la ecuación de Fokker-Planck, c) a través del método de integral de trayectoria. En la presente tesis se utiliza una ecuación de tipo Langevin, debido principalmente a que permite modelar el proceso dispersivo de manera relativamente fácil —a comparación de los otros dos métodos— cuando la parte estocástica de la dispersión (*i.e.*, la difusión molecular) tiene, como en el caso de este trabajo, una distribución de probabilidad de tipo gaussiana (Braun, 1984). Se aplicó una técnica de caminata aleatoria para obtener las posiciones de un número finito de partículas n en sucesivos pasos de tiempo, haciendo posible así medir la dispersión.

La técnica de caminata aleatoria ha demostrado ser confiable en la modelación de dispersión en flujos bidimensionales estacionarios (Sullivan, 1971), en el cálculo de coeficientes de dispersión y tiempo de viaje de material disuelto o suspendido en ríos (Wilson Jr. y Forrest, 1965); y en problemas de difusión turbulenta en la atmósfera (Thompson, 1971), el océano (Hunter, 1980a y 1980b), estuarios (Allen, 1982) y la zona costera (Godínez-Sandoval, 1986).

A la fecha, no existen estudios de dispersión de materia en un campo de velocidades determinista constituido por un vórtice, a pesar de la importancia de los vórtices oceánicos: éstos transportan considerables volúmenes de agua y de material durante largos períodos de tiempo (Flierl, 1984), y representan las componentes más energéticas a nivel de mesoescala en los océanos (Olson *et al.*, 1985).

El presente estudio tiene como fin analizar la cinemática del fenómeno de dispersión de partículas en dos dimensiones en vórtices circulares de tipo: a) rotacional, b) irrotacional y c) Rankine. Debido a que esta tesis es una primera aproximación al tema mencionado se consideró, para todos los casos, nula la velocidad de traslación del vórtice, esto con el fin de alcanzar una mayor simplicidad matemática.

II. OBJETIVO

Analizar el comportamiento físico del fenómeno de dispersión de partículas en presencia de un campo de velocidades determinista dado por un vórtice.

II. 1. Objetivos particulares

II. 1. 1. Utilizar una ecuación de tipo Langevin para modelar la dispersión de partículas en vórtices.

II. 1. 2. Utilizar la técnica de caminata aleatoria para modelar la componente estocástica de la velocidad de dispersión de las partículas.

II. 1. 3. Obtener: a) la posición en cada paso de tiempo de un número grande de partículas que se dispersan, b) la distribución de posiciones de las partículas para ciertos instantes de tiempo, y c) los momentos estadísticos que describen el desarrollo en el tiempo del proceso dispersivo.

II. 1. 4. Determinar cómo es afectado el transporte de partículas que se dispersan en presencia de un vórtice para los siguientes casos:

- a) al dominar la componente de velocidad determinista;
- b) al dominar la componente de velocidad aleatoria;
- c) cuando el orden de magnitud de la componente de velocidad determinista es igual al orden de magnitud de la componente de velocidad aleatoria.

II.1.5. Proponer los esquemas numéricos más eficientes para modelar la dispersión en cada tipo de vórtice, en cuanto a exactitud, precisión y aspectos de programación de los mismos (v.gr., reducción del tiempo de cálculo y del almacenaje de datos en la memoria de la computadora).

III. TEORÍA

III. 1. Difusión molecular y movimiento browniano

III. 1. 1. Concentración y flujo de materia

El comportamiento de los fluidos utiliza la hipótesis del continuo, dado que no se asignan velocidades a moléculas individuales, sino al promedio de las velocidades de moléculas presentes en volúmenes de control suficientemente grandes comparados con el cubo de la distancia promedio intermolecular. De manera análoga, en la teoría de la difusión molecular se inicia por definir la concentración C de sustancia difusiva como la masa ΔM contenida en el volumen de control ΔV :

$$C = \frac{\Delta M}{\Delta V}, \quad (1)$$

donde ΔV es grande comparado con a^3 , a es la distancia promedio entre las partículas que se dispersan.

Una consecuencia directa de la Ec. (1) es que los cambios en la concentración en la distancia promedio a son descritos, con un alto grado de aproximación, como:

$$C(x+a) - C(x) \approx a \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (2)$$

cualquiera que sea la orientación del eje x .

Cuando se tienen diferencias de concentración en un fluido, se genera un proceso de difusión que tiende a igualar la distribución de las impurezas en todo el volumen. La razón de difusión puede medirse localmente mediante el valor del flujo de materia, que es la masa de sustancia difusiva que atraviesa por un elemento de área $\Delta A \vec{n}$ por unidad de tiempo:

$$\vec{F} = \frac{\Delta M / \Delta t}{\Delta A} \vec{n}, \quad (3)$$

donde ΔM es la masa total de partículas que pasan a través del elemento de área $\Delta A \vec{n}$ durante el intervalo de tiempo Δt .

III. 1. 2. Leyes de Fick

Considérese ahora cómo se da el flujo de sustancia difusiva a través de movimiento browniano. Las moléculas o partículas se dispersan atravesando, en ambas direcciones, el área ΔA cuyo vector normal es $\vec{n}$; sin embargo, si la concentración cambia en la dirección $\vec{n}$, se tendrán más partículas provenientes del lado de ΔA que contenga un mayor número de éstas. Así, aunque no es posible describir la trayectoria de cada una de las moléculas, y a pesar de que ninguna de ellas tiene una dirección preferencial de movimiento, sí puede establecerse que la transferencia o flujo neto de moléculas será de la región de mayor concentración a aquella de menor concentración.

Supóngase que las partículas que provienen del lado (1) de la Fig. 1 tienen una velocidad promedio u_1 (en la dirección positiva de $\vec{n}$) y aquellas que siguen la dirección opuesta tienen una velocidad promedio u_2 . En el tiempo Δt las primeras partículas alcanzan una distancia $u_1 \Delta t$ más allá de $\Delta A \vec{n}$ y barren un volumen $u_1 \Delta A \vec{n} \Delta t$. Sea la concentración promedio C_1 , entonces el transporte unidireccional positivo a lo largo de $\vec{n}$, por unidad de área y unidad de tiempo, es $u_1 C_1$. De forma inversa, el transporte unidireccional negativo a lo largo de $\vec{n}$ es $u_2 C_2$ y el flujo neto obtenido es $(u_1 C_1 - u_2 C_2)$. Por hipótesis el medio es isotrópico, y por lo tanto puede asumirse que: a) $u_1 = u_2 = u_m$, b) $l_{m1} = l_{m2} = l_{mn}$; y c) C_1 y C_2 son iguales a la concentración C a una distancia promedio l_{m1} y l_{m2} , respectivamente, de $\Delta A \vec{n}$. El orden de magnitud de esta distancia es igual a la longitud promedio en la que la velocidad de una partícula se mantiene constante.

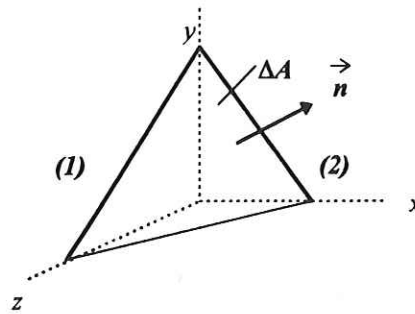


Fig. 1. Elemento de fluido de forma tetrahédrica (Tomado de Csanady, 1980).

Cuando las partículas difusivas son moléculas de tamaño similar al de las moléculas del medio en que se difunden, la *longitud de mezcla* l_m es igual en orden de magnitud a la distancia promedio intermolecular (Borg y Dienes, 1980). En el movimiento browniano esta longitud de mezcla puede ser mayor que la distancia libre promedio molecular, pero aún es posible considerarla como suficientemente pequeña para utilizar la Ec. (2), por lo tanto:

$$C_2 - C_1 = l_m \frac{\partial C}{\partial n}, \quad (4)$$

El flujo queda expresado como:

$$\vec{F}_n = -u_m l_m \frac{\partial C}{\partial n}, \quad (5)$$

Al introducir el coeficiente de difusión, D , para expresar el producto $u_m l_m$:

$$D = u_m l_m, \quad (6)$$

y sustituyendo la Ec. (6) en la Ec. (5), la ecuación que resulta, expresada en forma vectorial, se conoce como 1ª ley de Fick o, simplemente, como *ecuación de flujo difusivo*:

$$\vec{F} = -D\nabla C, \quad (7)$$

donde ∇ es el operador gradiente.

La 1ª ley de Fick permite relacionar la distribución espacial de la concentración con el flujo de materia. Una segunda relación entre las mismas variables se obtiene al aplicar el principio de continuidad o conservación de masa, de la siguiente manera:

Considérese un volumen de fluido V , encerrado por una superficie S , en el cual una sustancia está siendo transportada por difusión molecular. Sea $C(\vec{x}, t)$ la concentración de la sustancia difusiva, entonces la masa total que se difunde está dada por:

$$M(t) = \iiint_V C dV. \quad (8)$$

Suponiendo conservación de masa,

$$\frac{dM}{dt} = \frac{d}{dt} \iiint_V C dV = 0. \quad (9)$$

Sea $\vec{F}(\vec{x}, t)$ el flujo en todo punto sobre la superficie de frontera, al aplicar el teorema de transporte de Reynolds para un volumen fijo, la Ec. (9) queda expresada como:

$$\frac{dM}{dt} = \iiint_V \frac{\partial C}{\partial t} dV + \iint_S \vec{F} \cdot \hat{n} dS = 0, \quad (10)$$

y ahora, haciendo uso del teorema de la divergencia para convertir la integral de superficie en una integral de volumen, la Ec. (10) se transforma en:

$$\iiint_V \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{F} \right) dV = 0 \quad (11)$$

Como el volumen $V(t)$ es arbitrario se sigue que, para todo volumen, la integral tiene que ser igual a cero, por lo tanto:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{F}. \quad (12)$$

Como el flujo es causado en este caso por la difusión molecular, al aplicar la 1ª ley de Fick (Ec. (7)) a la Ec. (12), se obtiene la 2ª ley de Fick:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla C) \quad (13)$$

que, cuando D es independiente de la posición, puede expresarse como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C, \quad (14)$$

donde ∇^2 es el operador laplaciano. La Ec. (14) se conoce como *ecuación de difusión*.

III. 1. 3. Solución de la ecuación de difusión con condiciones iniciales y de frontera específicas

Soluciones generales de la ecuación de difusión pueden ser obtenidas para una gran variedad de condiciones iniciales y de frontera. Para el propósito de este trabajo, se desea encontrar una solución de la ecuación en una dimensión con las siguientes condiciones:

- i) En el tiempo inicial ($t = 0$), la concentración total C de la sustancia es igual a cero en todas partes excepto en el origen ($\vec{x} = 0$);
- ii) para $t \geq 0$ y $|\vec{x}| \rightarrow \infty$, $C \rightarrow 0$.

La solución de la Ec. (14) con las condiciones anteriores es (Crank, 1975):

$$C = \frac{\alpha}{t^{1/2}} \exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right), \quad (15)$$

donde α es una constante. Para obtener el valor de α , se retoma que la cantidad total de materia que se difunde en un volumen V es dada por la Ec. (8), y al sustituir en ésta la Ec. (15), se tiene que:

$$M = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha}{t^{1/2}} \exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right) dx. \quad (16)$$

Como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = \sqrt{\pi}, \quad (17)$$

entonces,

$$M = 2\alpha(\pi Dt)^{1/2}. \quad (18)$$

Al despejar α de la Ec. (18) y sustituir en la Ec. (15), la ecuación resultante es:

$$C = \frac{M}{2(\pi Dt)^{1/2}} \exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right), \quad (19)$$

la cual describe una distribución gaussiana y representa el transporte por difusión molecular de una cantidad total de materia M depositada en un tiempo $t = 0$ en el punto $x = 0$.

III. 2. Caminata aleatoria

El objetivo de esta sección es llegar a una expresión que permita calcular los cambios en la concentración de partículas que se dispersan, en términos de la probabilidad de que cada una de estas partículas se encuentre a cierta distancia del origen de la dispersión para cierto tiempo. Con este fin, una solución de la ecuación de difusión (Ec. (14)) puede ser obtenida directamente de la aplicación de la teoría de la caminata aleatoria (Chandrasekhar, 1943). Considérese, para simplificar la exposición, el caso en una dimensión: una partícula experimenta una serie de desplazamientos a lo largo de una línea en sentido positivo o negativo (derecha o izquierda), con

igual probabilidad de decisión $P = 0.5$; supóngase además que todos los pasos q dados por la partícula tienen la misma longitud. Así, la partícula tiene en cada iteración N (es decir, en cada paso de tiempo) únicamente dos opciones: moverse hacia la izquierda o hacia la derecha. Como corolario, la probabilidad de que en cada iteración N la partícula no se mueva de la posición que ocupaba en la iteración $N-1$ es nula.

En $N = 0$ la partícula se encuentra en el origen y por lo tanto el valor de la probabilidad es máximo ($P = 1$). En $N = 1$ la partícula tiene igual probabilidad de estar a un paso hacia la izquierda o hacia la derecha; en $N = 2$ la probabilidad de estar a dos pasos del origen es igual a la probabilidad de obtener un resultado idéntico en dos “volados” sucesivos. Obsérvese el caso con mayor detalle:

Probabilidad de que la partícula esté a q pasos del origen

	q				
N	-2	-1	0	1	2
0			1		
1		$\leftarrow 1/2 \rightarrow$	0	$\leftarrow 1/2 \rightarrow$	
2		0		0	

En $N = 1$ la partícula está en $q = +1$ ó en $q = -1$, como en cada una de estas posiciones esta partícula tiene una probabilidad igual a $1/2$ de moverse hacia uno u otro sentido, entonces el número total de posibles movimientos es igual a cuatro; por consiguiente:

Probabilidad de que la partícula esté a q pasos del origen

	q				
N	-2	-1	0	1	2
0			1		
1		$1/2$	0	$1/2$	
2	$1/4$	0	$1/4 + 1/4$	0	$1/4$

En cada iteración N la suma de las probabilidades tiene que ser igual a 1, ya que necesariamente la partícula se encuentra en alguna de las posiciones correspondientes a la respectiva iteración.

Examínese ahora el caso para $N=2$: si la partícula está en el origen, puede efectuar dos posibles movimientos por cada una de las probabilidades independientes ($1/4 + 1/4$) de que dicha partícula hubiera llegado a $q = 0$ y, al igual que en el caso de $N=1$, si la partícula se encuentra a dos pasos del origen, puede realizar dos movimientos posibles. Así, el número total de movimientos posibles es de ocho, pero tres de los mismos conducen a $q = 1$, y otros tres a $q = -1$, por lo tanto:

Probabilidad de que la partícula esté a q pasos del origen		q				
N		-2	-1	0	1	2
0				1		
1			1/2	0	1/2	
2				0	0	
3						

Diagram illustrating transitions for $N=2$ and $N=3$ with arrows and probabilities:

- From $N=2, q=0$ to $N=3, q=-1$ with probability $1/4$ (left arrow).
- From $N=2, q=0$ to $N=3, q=1$ with probability $1/4$ (right arrow).
- From $N=2, q=0$ to $N=3, q=0$ with probability $1/4 + 1/4$ (double arrow).
- From $N=3, q=-2$ to $N=2, q=-1$ with probability $1/8$ (left arrow).
- From $N=3, q=-1$ to $N=2, q=0$ with probability $3/8$ (left arrow).
- From $N=3, q=1$ to $N=2, q=0$ with probability $3/8$ (right arrow).
- From $N=3, q=2$ to $N=2, q=1$ with probability $1/8$ (right arrow).

A partir de las observaciones anteriores, es posible obtener la siguiente tabla:

Tabla I. Caminata aleatoria en una dimensión. Probabilidad de que una partícula se encuentre ubicada a q pasos del origen después de N iteraciones aleatorias.

		q										
N		-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
0							1					
1						1/2	0	1/2				
2					1/4	0	2/4	0	1/4			
3				1/8	0	3/8	0	3/8	0	1/8		
4			1/16	0	4/16	0	6/16	0	4/16	0	1/16	
5		1/32	0	5/32	0	10/32	0	10/32	0	5/32	0	1/32

Los numeradores de la Tabla I son idénticos a los valores correspondientes a un triángulo de Pascal, que a su vez es resultado de un binomio de Newton; es decir, tales valores pueden ser generados mediante el número de combinaciones Z de n elementos tomados de r en r , de acuerdo con la fórmula:

$${}_n Z_r = \frac{n!}{r!(n-r)!}. \quad (20)$$

Al aplicar esta fórmula para determinar el número total de secuencias distintas posibles para llegar a la posición q en N iteraciones —dado que la partícula, para llegar a la posición q ó $-q$, requiere de $(N+q)/2$ pasos en una dirección y el resto de $(N-q)/2$ pasos en la dirección opuesta—, se obtiene:

$${}_N Z_{(N+q)/2} = {}_N Z_{(N-q)/2} = \frac{N!}{[\frac{1}{2}(N+q)]![\frac{1}{2}(N-q)]!}. \quad (21)$$

Por otro lado, la probabilidad de toda secuencia independiente de N pasos es igual a $(1/2)^N$, ésta debe ser multiplicada por el número total de secuencias posibles que conducen a q . De tal forma, la probabilidad de que la partícula esté a q pasos del origen en la iteración N está dada por (Chandrasekhar, 1943):

$$P(q, N) = \left(\frac{1}{2}\right)^N \frac{N!}{[\frac{1}{2}(N+q)]![\frac{1}{2}(N-q)]!}, \quad (22)$$

que describe una distribución bernoulliana, donde $q > N$ no tiene sentido, ya que la partícula requiere un número de iteraciones mayor o igual al valor de la posición más alejada del origen en la i -ésima iteración para alcanzar dicha posición. Nótese que q puede ser par o non sólo si N es a su vez par o non, respectivamente.

Cuando N es grande y $q \ll N$, es posible simplificar la Ec. 22 mediante la fórmula de Stirling:

$$\begin{aligned} \log n! &= (n + \frac{1}{2}) \log n - n + \frac{1}{2} \log 2\pi \\ &+ O(n^{-1}) \quad (n \rightarrow \infty). \end{aligned} \quad (23)$$

El resultado final es (Chandrasekhar, 1943):

$$P(q, N) = (2 / \pi N)^{1/2} \exp(-q^2 / 2 N). \quad (24)$$

La Ec. (24) permite que el cálculo de la probabilidad $P(q, N)$ sea más rápido, al evitar el uso de factoriales. Es conveniente, cuando N es grande y para establecer la relación que existe entre la caminata aleatoria y la ecuación de difusión, pasar de una distribución discreta a una distribución continua, y expresar el resultado dado por la Ec. (24) en términos de cantidades medibles experimentalmente, *i.e.*, el desplazamiento cuadrático medio x (también conocido como distancia de penetración), el coeficiente de difusión D y el tiempo t durante el cual se lleva cabo el fenómeno. Con este fin se introduce la variable x en vez de q :

$$x = ql \quad (25)$$

donde l es la longitud de cada paso (en los experimentos numéricos realizados $l = 1$). Además, si se consideran intervalos Δx grandes comparados con la longitud de un paso, se tiene que la probabilidad $P(x)\Delta x$ de que la partícula se halle en el intervalo $x, x+\Delta x$, después de N iteraciones, es:

$$P(x, N)\Delta x = P(q, N)(\Delta x / 2l), \quad (26)$$

ya que el valor de q sólo puede ser par o impar, dependiendo de si N es a su vez par o impar. Al combinar las Ec. (24), (25) y (26) se obtiene:

$$P(x, N) = \frac{1}{(2\pi Nl^2)^{1/2}} \exp(-x^2 / 2Nl^2). \quad (27)$$

Ahora, suponiendo que la partícula sufre z desplazamientos por unidad de tiempo, la probabilidad de que la partícula se encuentre entre x y $x+\Delta x$, después de un tiempo t , está dada por:

$$P(x,t) = \frac{1}{2(\pi Dt)^{1/2}} \exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right). \quad (28)$$

donde:

$$D = \frac{1}{2} z l^2. \quad (29)$$

Como puede verse, al comparar la Ec. (28) con la expresión para la concentración C dada por la Ec. (15), esta probabilidad $P(x,t)$ es una solución de la ecuación de difusión (Ec. (14)) en una dimensión, por lo que la constante D puede ser considerada como un coeficiente de difusión, que en los experimentos numéricos realizados es igual a $1/2$. Nótese que: a) la probabilidad de hallar una partícula en el intervalo $x, x+\Delta x$ es igual al número de partículas que se encuentran en ese intervalo, dividida entre el número total de partículas que se dispersan (cuando este número tiende a infinito); y b) por lo tanto, la Ec. (28) es una manera de obtener valores de concentración de partículas mediante una aplicación estadística.

III. 3. Ecuación de Langevin

El movimiento aleatorio que exhiben partículas de tamaño coloidal inmersas en un fluido (movimiento browniano) es debido a las colisiones de las partículas en movimiento (partículas brownianas) con las moléculas del fluido circundante (Einstein, 1905, citado por Braun, 1991). En la mayoría de los casos de interés la concentración de las partículas brownianas es suficientemente baja; así, el movimiento de cada una de ellas es independiente del movimiento de las partículas restantes (Csanady, 1973). La teoría del movimiento browniano representa una base de gran utilidad para la resolución de problemas más complejos de dispersión de partículas.

Una teoría dinámica del movimiento browniano puede desarrollarse a partir de las siguientes hipótesis:

1) Por un lado, el tamaño de la partícula browniana es mucho mayor que el tamaño de las moléculas del fluido circundante, por lo que esta partícula experimenta una fuerza determinista que se opone a su movimiento y que es debida a la fricción. Si la velocidad de la partícula es pequeña, comparada con la velocidad del fluido, entonces la *fuerza determinista* es igual a $-\beta \vec{v}(t)$ (ley de Stokes), donde $\vec{v}(t)$ es la velocidad de la partícula y β es una constante, de dimensión s^{-1} , directamente proporcional al coeficiente de viscosidad del fluido.

2) Por otro lado, el tamaño de la partícula es suficientemente pequeño; por lo que el movimiento de la partícula es afectado por colisiones moleculares; estas colisiones ejercen una *fuerza estocástica* $\vec{E}(t)$ sobre la partículas. La fuerza estocástica $\vec{E}(t)$ varía más rápidamente que la fuerza sistemática, lo que implica que existen dos escalas de tiempo bien diferenciadas en el movimiento browniano: en la primera, del orden de microsegundos, la partícula se comporta como partícula libre (aún no siente el efecto de las colisiones moleculares); en la segunda, del orden de segundos, se tiene un comportamiento difusivo de la partícula.

De tal manera, la ecuación que describe el movimiento browniano es la expresión para la suma de las fuerzas determinista y estocástica mencionadas:

$$m \frac{d \vec{v}(t)}{dt} = -\beta \vec{v}(t) + \vec{E}(t) \quad (30)$$

donde m es la masa de la partícula browniana.

La Ec. (30) se conoce como ecuación de Langevin y no es más que la segunda ley de Newton aplicada al movimiento browniano.

La ecuación de Langevin es una ecuación diferencial estocástica, ya que únicamente se conoce la estadística de $\vec{E}(t)$ y, por consiguiente, sólo es posible determinar la distribución de probabilidad de ocurrencia de $\vec{v}$ al tiempo t , dado que se tiene una velocidad inicial $\vec{v} = \vec{v}(0)$ en $t = 0$.

III. 4. Vorticidad

Antes de presentar las ecuaciones que describen la componente determinista de la dispersión en esta tesis, y con el fin de permitir una mejor comprensión de dichas ecuaciones, es recomendable revisar los principales conceptos involucrados:

La vorticidad en un fluido está definida por (Kundu, 1990):

$$\vec{\omega} = \nabla \times \vec{u} \quad (31)$$

Otro concepto importante para este tema es el de circulación, Γ , alrededor de una trayectoria cerrada C , definida como la integral de línea de la velocidad ó, una vez aplicado el teorema de Stokes, como el flujo de vorticidad a través de la superficie abierta S acotada por la curva cerrada C :

$$\Gamma = \oint_C \vec{u} \cdot d\vec{r}, \quad (32)$$

donde $d\vec{r}$ es el elemento de línea tangente a la curva cerrada C .

Tres de los tipos básicos de flujos que siguen trayectorias circulares, y que fueron considerados como la parte determinista del modelo de dispersión en los experimentos realizados en este trabajo, son los siguientes:

III. 4. 1. Vórtice rotacional

En general, en coordenadas polares (r, θ) , la velocidad del fluido es descrita por las componentes:

$$u_r = \frac{dr}{dt}, \quad u_\theta = r \frac{d\theta}{dt} = r\Omega, \quad (33)$$

donde u_r es la componente de velocidad radial, u_θ es la componente de velocidad tangencial y Ω es la velocidad angular. Para un vórtice con rotación de cuerpo sólido:

$$u_r = 0, \quad u_\theta = \Omega r \quad (34)$$

En el caso particular de un vórtice rotacional u_θ es proporcional al radio de las líneas de corriente del flujo (Fig. 2).

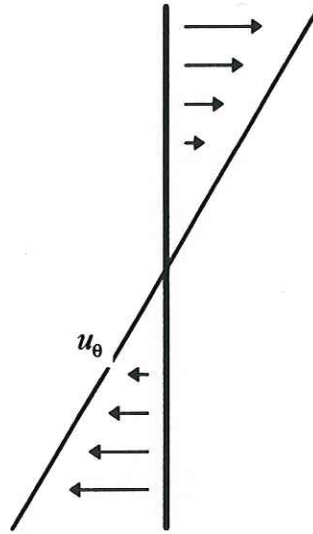


Fig. 2. Campo de velocidades generado por un vórtice rotacional. La longitud de cada vector de velocidad es directamente proporcional a la intensidad del mismo.

La circulación alrededor de un circuito de radio r en este flujo es:

$$\Gamma = \int \vec{u} \cdot d\vec{r} = \int_0^{2\pi} u_\theta r d\theta = 2\pi r^2 \Omega. \quad (35)$$

III. 5. 2. Vórtice irrotacional

De forma contrastante con el primer tipo de vórtice, en un vórtice irrotacional la velocidad u_θ es inversamente proporcional al radio (Fig. 3). Es decir,

$$u_r = 0, \quad u_\theta = c/r, \quad (36)$$

donde c es una constante.

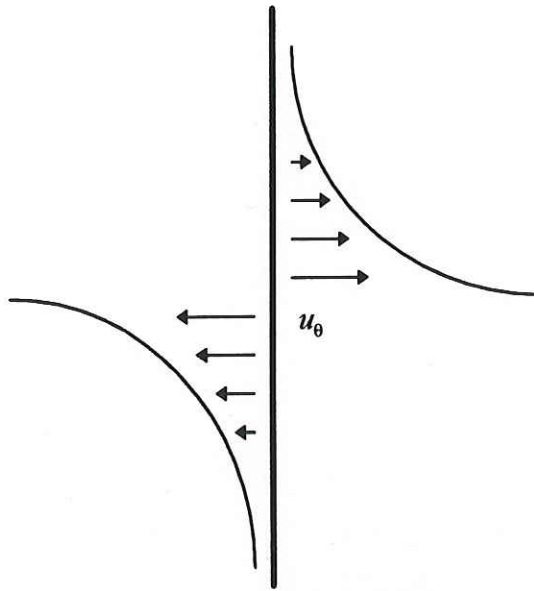


Fig. 3. Como en Fig. 2, pero en el caso de un vórtice irrotacional.

Al utilizar la Ec. (31) para hallar la vorticidad en todo punto del flujo:

$$\vec{\omega} = 0 / r, \quad (37)$$

lo que significa que la vorticidad es cero en todo punto del flujo excepto en el origen, donde su valor no puede ser determinado a partir de esta expresión.

Por otro lado, la circulación alrededor de cualquier contorno que encierre al origen es:

$$\Gamma = \int_0^{2\pi} u_\theta r d\theta = 2\pi c. \quad (38)$$

Para un contorno que encierre al origen se tiene que, al aplicar el teorema de Stokes para convertir la integral de contorno en una integral de área:

$$\Gamma = \int_A \vec{\omega} \cdot d\vec{A}, \quad (39)$$

el lado izquierdo de la Ec. (39) no es cero, lo que implica que $\vec{\omega}$ no debe ser cero en algún lugar dentro del área encerrada por el contorno. Como Γ es independiente de r , es posible comprimir el contorno sin alterar el lado izquierdo de la Ec. (39). En el límite, el área se aproxima a cero y la vorticidad tiene que ser infinita para que $\vec{\omega} \cdot d\vec{A}$ tenga un límite finito distinto de cero en el origen. Por lo tanto, el flujo es irrotacional en todo punto excepto en el origen, donde la vorticidad es infinita.

III. 5. 3. Vórtice de Rankine

Este tipo de vórtice tiene un núcleo de radio R con vorticidad uniforme, donde la distribución de la velocidad es igual que en el caso del vórtice rotacional (Ec. (34)), y afuera de este núcleo el flujo es irrotacional (Fig. 4). El vórtice de Rankine es descrito por:

$$u_\theta = \Omega r \quad u_r = 0, \quad \text{si} \quad r < R \quad (40a)$$

y

$$u_\theta = \Omega R^2/r \quad u_r = 0 \quad \text{si} \quad r \geq R. \quad (40b)$$

Nótese que u_θ es continua en $r = R$.

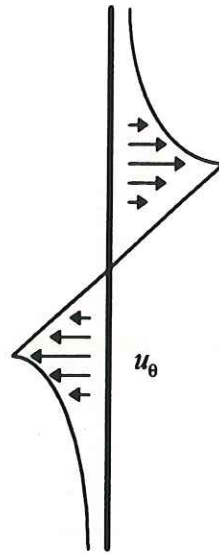


Fig. 4. Como en Fig. 2, pero en el caso de un vórtice de Rankine.

IV. MÉTODO

V. 1. Modelo de dispersión

Las Ecs. (34), (36) y (40) están dadas en un sistema de coordenadas polares (r, θ) . Conviene, para fines prácticos tanto de resolución numérica como de programación de las soluciones, realizar un cambio del sistema de coordenadas polares a un sistema de coordenadas cartesianas (x, y) . Se tiene que:

$$\cos \theta = x/r, \quad \text{sen} \theta = y/r;$$

entonces,

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \text{ sen} \theta. \quad (41)$$

Las componentes de velocidad, para dos dimensiones, en coordenadas cartesianas son:

$$u = \frac{dx}{dt}, \quad v = \frac{dy}{dt} \quad (42)$$

Al sustituir (41) en (42) y derivar se obtiene:

$$u = \frac{d(r \cos \theta)}{dt} = \frac{dr}{dt} \cos \theta - r \text{ sen} \theta \frac{d\theta}{dt}, \quad (43a)$$

$$v = \frac{d(r \text{ sen} \theta)}{dt} = \frac{dr}{dt} \text{ sen} \theta + r \cos \theta \frac{d\theta}{dt} \quad (43b)$$

Ahora, para el caso de un vórtice rotacional, $u_r = 0$ (Ec. (34)) y por lo tanto:

$$u = -\Omega r \text{ sen} \theta, \quad (44a)$$

$$v = \Omega r \cos \theta \quad (44b)$$

y al sustituir (41) en (44), se llega a:

$$u = -\Omega y, \quad (45a)$$

$$v = \Omega x \quad (45b)$$

Las Ec. (45a) y (45b) son las componentes de velocidad, en coordenadas cartesianas, que describen un vórtice rotacional.

A través de un desarrollo análogo al descrito anteriormente se obtienen las componentes de velocidad para un vórtice irrotacional (con circulación Γ):

$$u = -\frac{y\Gamma}{2\pi(x^2 + y^2)}, \quad (46a)$$

$$v = \frac{x\Gamma}{2\pi(x^2 + y^2)} \quad (46b)$$

y para el vórtice de Rankine:

$$u = -\Omega y, \quad v = \Omega x, \quad x^2 + y^2 < R \quad (47a)$$

$$u = -\frac{\Omega R^2 y}{x^2 + y^2}, \quad v = \frac{\Omega R^2 x}{x^2 + y^2}, \quad x^2 + y^2 \geq R; \quad (47b)$$

Las Ec. (45), (46) y (47) describen la parte determinista del proceso dispersivo. En ausencia de difusión molecular las trayectorias seguidas por n partículas, que se mueven de acuerdo con estas ecuaciones, son círculos. Esto puede demostrarse al resolver, por ejemplo, el sistema de ecuaciones para el caso de un vórtice rotacional; con este fin se multiplica (45a) por x , y (45b) por y , y sumando ambas:

$$x \frac{dx}{dt} + y \frac{dy}{dt} = 0$$

es decir,

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} (x^2 + y^2) = 0,$$

y al integrar:

$$x^2 + y^2 = \gamma \quad (48)$$

donde γ es una constante de integración arbitraria. Por tanto, la solución del vórtice rotacional es la ecuación que describe un círculo (Ec. 48). Un desarrollo análogo puede hacerse para los dos tipos de vórtices restantes.

Por otro lado, la parte estocástica de la dispersión es debida a una velocidad aleatoria, $\vec{u}_a = (u_a, v_a)$, cuyos valores son generados aleatoriamente. La distribución de probabilidad de la velocidad aleatoria es de tipo uniforme-discreta, y puede tomar, con idéntica probabilidad igual a 0.5, los valores $+1$ y -1 en cada intervalo de tiempo de integración (Fig. 5). Las componentes de velocidad (u_a, v_a) son independientes una de la otra, aún en el mismo instante de tiempo, y no tienen por qué ser (en general, no lo son) iguales. Los momentos estadísticos que describen esta distribución de probabilidad tienen los valores:

a) Media:

$$\langle u_a \rangle = \sum f(u_a) u_a = 0;$$

b) Varianza:

$$\langle (u_a - \langle u_a \rangle)^2 \rangle = \langle u_a^2 \rangle = \sum f(u_a) u_a^2 = \frac{1}{2}$$

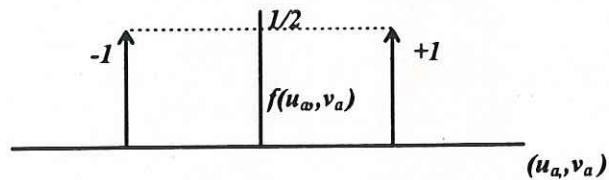


Fig. 5. Distribución de probabilidad de la velocidad aleatoria.

Al sumar las velocidades determinista y aleatoria se obtiene la ecuación de tipo Langevin que describe el proceso dispersivo:

$$\vec{u}_T = \vec{u}_d + \vec{u}_a \quad (49)$$

y al sustituir la componente de velocidad determinista, u_d , por la expresión correspondiente en cada caso, se llega a las ecuaciones que describen la dispersión en un:

a) Vórtice rotacional

$$u_T = \frac{dx}{dt} = u_a - \Omega y \quad (50a)$$

$$v_T = \frac{dy}{dt} = v_a + \Omega x \quad (50b)$$

b) Vórtice irrotacional:

$$\frac{dx}{dt} = u_a - \frac{\Gamma y}{2\pi(x^2 + y^2)} \quad (51a)$$

$$\frac{dy}{dt} = v_a + \frac{\Gamma x}{2\pi(x^2 + y^2)}; \quad (51b)$$

c) Vórtice de Rankine:

si $x^2 + y^2 < R^2$,

$$\frac{dx}{dt} = u_a - \Omega y \quad (52a)$$

$$\frac{dy}{dt} = v_a + \Omega x \quad (52b)$$

si $x^2 + y^2 \geq R^2$,

$$\frac{dx}{dt} = u_a - \frac{\Omega R^2 y}{(x^2 + y^2)} \quad (53a)$$

$$\frac{dy}{dt} = v_a + \frac{\Omega R^2 x}{(x^2 + y^2)}. \quad (53b)$$

Las Ecs. (50), (51), (52) y (53) fueron integradas numéricamente. Se utilizó el método de diferencias finitas por razones que serán discutidas en la sección correspondiente. En todos los casos se introdujo variable compleja al resolver las ecuaciones, por lo que fueron definidas las variables:

$$X = x + iy \quad (54)$$

y

$$U_a = u_a + iv_a, \quad (55)$$

donde

$$i = \sqrt{-1}$$

IV. 2. Solución numérica del modelo de dispersión

Una descripción detallada de la resolución numérica en cada caso es la siguiente:

IV. 2. 1. Vórtice rotacional

Al multiplicar (50b) por i y sumar a (50a):

$$\frac{d(x + iy)}{dt} = (u_a + iv_a) + \Omega i(x + iy) \quad (56)$$

sustituyendo (54) y (55) en la Ec. (56):

$$\frac{dX}{dt} = U_a + \Omega iX \quad (57)$$

y, al resolver explícitamente dentro de un esquema de segundo nivel ("salto de rana"):

$$\begin{aligned} \frac{X^{t+1} - X^{t-1}}{2\Delta t} &= U_a + \Omega iX^t \\ X^{t+1} &= X^{t-1} + 2\Omega i\Delta t X^t + U_a 2\Delta t \end{aligned}$$

donde X^t , X^{t+1} y X^{t-1} indican la posición de las partículas en los tiempos actual, posterior y anterior al tiempo para el que se efectúa el cálculo de dicha posición.

Definiendo una variable $\alpha = 2\Omega i\Delta t$ para mayor comodidad:

$$X^{t+1} - X^{t-1} - \alpha X^t = U_a 2\Delta t$$

Aprovechando la linealidad de la ecuación, se obtendrá la solución homogénea y, al final, se sumará la parte aleatoria $U_a 2\Delta t$. Entonces,

$$X^{t+1} - X^{t-1} - \alpha X^t = 0$$

Se propone:

$$X^{t+1} = \lambda X^t$$

$$X^t = \lambda X^{t-1},$$

donde a λ se le llama factor de amplificación. Entonces,

$$\lambda X^t - \lambda^{-1} X^t - \alpha X^t = 0$$

$$X^t (\lambda - \lambda^{-1} - \alpha) = 0$$

X^t no debe ser cero (solución trivial), por lo tanto, al multiplicar ambos lados de la ecuación por λ , se llega a:

$$\lambda^2 - \lambda\alpha - 1 = 0,$$

que es una ecuación cuadrática factible de resolverse mediante fórmula general. Así, se obtiene:

$$\lambda = \frac{\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 4}}{2}$$

ó,

$$\lambda = \Omega i\Delta t \pm \sqrt{1 - \Omega^2 \Delta t^2} \quad (58)$$

Si $|\Omega\Delta t| \leq 1$ (se utiliza el valor absoluto debido a que Ω puede tomar valores negativos), entonces el esquema es neutral, ya que:

$$|\lambda| = \sqrt{\Omega^2 \Delta t^2 + 1 - \Omega^2 \Delta t^2} = 1.$$

Sin embargo, se tiene un modo físico y uno computacional:

$$\lambda_1 = \lambda_+ \rightarrow 1 \quad \text{si } \Delta t \rightarrow 0 \quad (\text{modo físico})$$

$$\lambda_2 = \lambda_- \rightarrow -1 \quad \text{si } \Delta t \rightarrow 0 \quad (\text{modo computacional})$$

Si $|\Omega\Delta t| > 1$, entonces el esquema es inestable o estable, puesto que:

$$\lambda = i\Omega\Delta t \pm i\sqrt{\Omega^2\Delta t^2 - 1},$$

entonces,

$$|\lambda| = |\Omega\Delta t \pm \sqrt{\Omega^2\Delta t^2 - 1}| \neq 1$$

Por último, sumando la parte aleatoria, el resultado final es:

$$X^{t+1} = \lambda X^t + 2\Delta t U_a \quad (59)$$

donde:

$$\lambda = \Omega i\Delta t + \sqrt{1 - \Omega^2\Delta t^2}.$$

IV. 2. 2. Vórtice irrotacional

Las Ecs. (51) fueron resueltas, al igual que en el caso del vórtice rotacional, por diferencias finitas, dentro de un esquema de segundo nivel. En este caso Ω ya no es constante, y se desea un esquema neutral (es decir, ni inestable ni disipativo), al menos cuando $U_a = 0$, para alcanzar una mayor exactitud en la solución. Por consiguiente, al seguir un desarrollo análogo al mostrado para el vórtice rotacional, se llega a la Ec. (59), redefiniendo Ω como:

$$\Omega = \frac{\Gamma}{2\pi |X^t|^2}. \quad (60)$$

IV. 2. 3. Vórtice de Rankine

Las Ecs. (52) y (53) se resolvieron por diferencias finitas, utilizando un esquema de segundo nivel. La solución es idéntica a la Ec. (59) y sólo es necesario redefinir Ω de manera tal que corresponda a aquella dada para los vórtices rotacional, cuando $r < R$; e irrotacional, cuando $r \geq R$ (Ec. 60).

V. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

V. 1. Análisis del comportamiento físico de la dispersión de partículas en vórtices

La dispersión de n partículas, con $n = 1000$, en presencia de un vórtice de tipo: a) rotacional; b) irrotacional, y c) de Rankine, fue simulada mediante la integración, por el método numérico mencionado en la sección anterior, de las Ecs. (50), (51) y (52), respectivamente (Tabla II). Los valores asignados a N , Ω y Γ equivalen a que una partícula que comienza a moverse a partir de la posición $(1,1)$ y en ausencia de difusión molecular, complete tres vueltas alrededor del origen del vórtice (rotacional, irrotacional o de Rankine) ubicado en $(0,0)$.

Tabla II. Dispersión de partículas en presencia de un vórtice.
Experimentos numéricos realizados.

Vórtice	Ω	Γ	f_{ua}	Condición inicial	R	n	N	Δt
Rotacional	1		0.1	Ia, Ib, IIa, IIb		1000	378	0.05
			1.0	Ia, Ib, IIa, IIb				
			10.0	Ia, Ib, IIa, IIb				
Irrotacional		1	0.1	Ib, IIa, IIb		1000	500	0.05
			1.0	Ib, IIa, IIb				
			10.0	Ib, IIa, IIb				
Rankine	1		0.1	Ia, Ib, IIa, IIb	$\sqrt{2}$	1000	500	0.05
			1.0	Ia, Ib, IIa, IIb				
			10.0	Ia, Ib, IIa, IIb				

Las cuatro diferentes condiciones iniciales con las que se simuló la dispersión en cada serie de experimentos numéricos (*i.e.*, en cada tipo de vórtice) fueron las siguientes:

Ia) todas las partículas localizadas en un punto ubicado en el centro del vórtice $(0,0)$ (Figs. 6 y 13) —no es posible considerar esta condición inicial en el caso de un vórtice irrotacional, puesto que la Ec. (51) se indetermina—;

Ib) todas las partículas localizadas en un punto ubicado en $(1,1)$, es decir, en una posición distinta a la del centro del vórtice (Figs. 7 y 10);

IIa) todas las partículas localizadas aleatoriamente dentro de una nube de radio $r_n = 1$, el centro de la nube y el centro del vórtice se encontraban en $(0,0)$ (Figs. 8 y 11);

IIb) todas las partículas localizadas aleatoriamente dentro de una nube de radio $r_n = 1$, el centro de la nube (ubicado en $(1,1)$) se encontraba en una posición distinta a la del centro del vórtice (Figs. 9, 12 y 14).

Se decidió que la mitad de las simulaciones fueran realizadas con las condiciones iniciales IIa y IIb descritas en el método debido a que, físicamente, se aproxima más a la realidad suponer la presencia en el medio acuático de una mancha de cierta sustancia que se dispersa, a considerar que la masa total de dicha sustancia se encuentra concentrada en un sólo punto (lo que, matemáticamente, equivale a una delta de Dirac), aunque esta última consideración puede ser explicada físicamente por la existencia de una fuente (*v.gr.* un desagüe) desde la cual es liberada toda la sustancia en un tiempo inicial.

La nube (mancha) de partículas que se genera en todas las simulaciones realizadas adquiere una forma circular debido a que tanto $\vec{u}_d$ como $\vec{u}_a$ no actúan en un sentido preferencial, sino que su valor es idéntico en toda dirección e independiente de esta última, lo que fue definido arbitrariamente desde un principio, pero que no tiene que ser necesariamente así y en general no lo es en la realidad, donde la difusión turbulenta es más común que la difusión molecular (Csanady, 1980).

Un factor de velocidad aleatoria, f_{ua} , se introdujo con el fin de tener un control sobre la contribución de la componente de velocidad estocástica, $\vec{u}_a$, en la dispersión. De esta manera, la dominancia de una componente de velocidad sobre la otra en las simulaciones es una función de: a) la distancia a la que se encuentra una cierta partícula con respecto al centro del vórtice; y b) el factor de velocidad aleatoria correspondiente a cada simulación. A partir de las consideraciones anteriores y tomando como base los casos más representativos, un análisis más detallado de la dispersión en cada tipo de vórtice es el siguiente:

Dispersión en un vórtice rotacional. Dado que la velocidad de una partícula es la distancia que recorre en un intervalo de tiempo y que, en el caso de $\vec{u}_a$ toda partícula se mueve un paso en cada iteración N :

$$|\vec{u}_a| = \frac{\sqrt{1+1}}{1} f_{ua} = \sqrt{2} f_{ua},$$

expresión que permite encontrar, al igualarla con $\vec{u}_d$, el radio r a partir del cual una componente de velocidad es mayor que la otra y que, desde este momento será conocido como R_{lim} . Lo que se obtiene es:

$$R_{lim} = \frac{\sqrt{2} f_{ua}}{\Omega}, \quad (61)$$

y, al considerar el caso de dispersión en un vórtice rotacional, cuando el radio r en el que se hallan las partículas dispersivas es mayor que R_{lim} , $\vec{u}_d$ domina sobre $\vec{u}_a$. El valor de R_{lim} , varía, al igual que f_{ua} , en múltiplos de 10, tomando los valores de 0.14, 1.41 y 14.1 para f_{ua} igual a 0.1, 1.0 y 10.0, respectivamente.

El comportamiento de las simulaciones realizadas concordó con los valores calculados para R_{lim} : cuando $f_{ua} = 0.1$ se observa claramente cómo la difusión molecular es el principal proceso por el cual las partículas se dispersan, al comenzar a moverse de acuerdo con la condición inicial Ia (Fig. 6, iteraciones $N = 1$ a 142) y mientras que se mantienen dentro del radio R_{lim} ; sucede lo contrario durante todo el proceso cuando, con igual f_{ua} , la condición inicial es remplazada por la Ib, ya que ahora desde un inicio las partículas se encuentran fuera del radio R_{lim} (Fig. 7), y en consecuencia la nube gira alrededor del origen del vórtice variando el valor de su diámetro en el orden de décimas. Si se aumenta el valor de f_{ua} a 1.0, el resultado es que durante aproximadamente la mitad de la duración total del proceso domina la difusión y por ello el diámetro de la nube aumenta en el orden de unidades (Fig. 9).

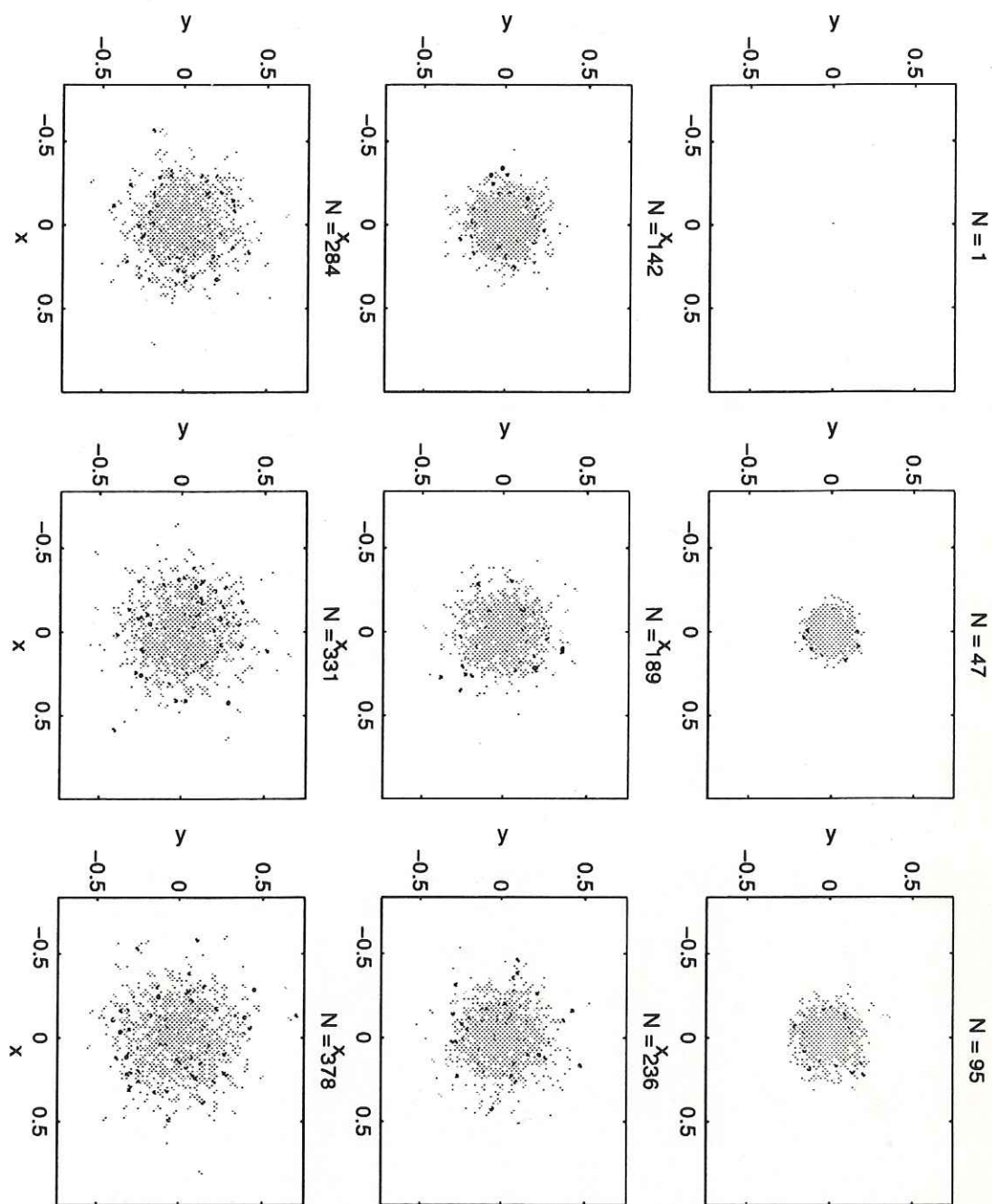


Fig. 6. Dispersión de partículas en un vórtice rotacional con condición inicial Ia (ver sección VI), $f_{ua} = 0.1$ y $\Omega = 1$. Se muestran las posiciones de todas las n partículas ($n = 1000$) para ciertas iteraciones N .

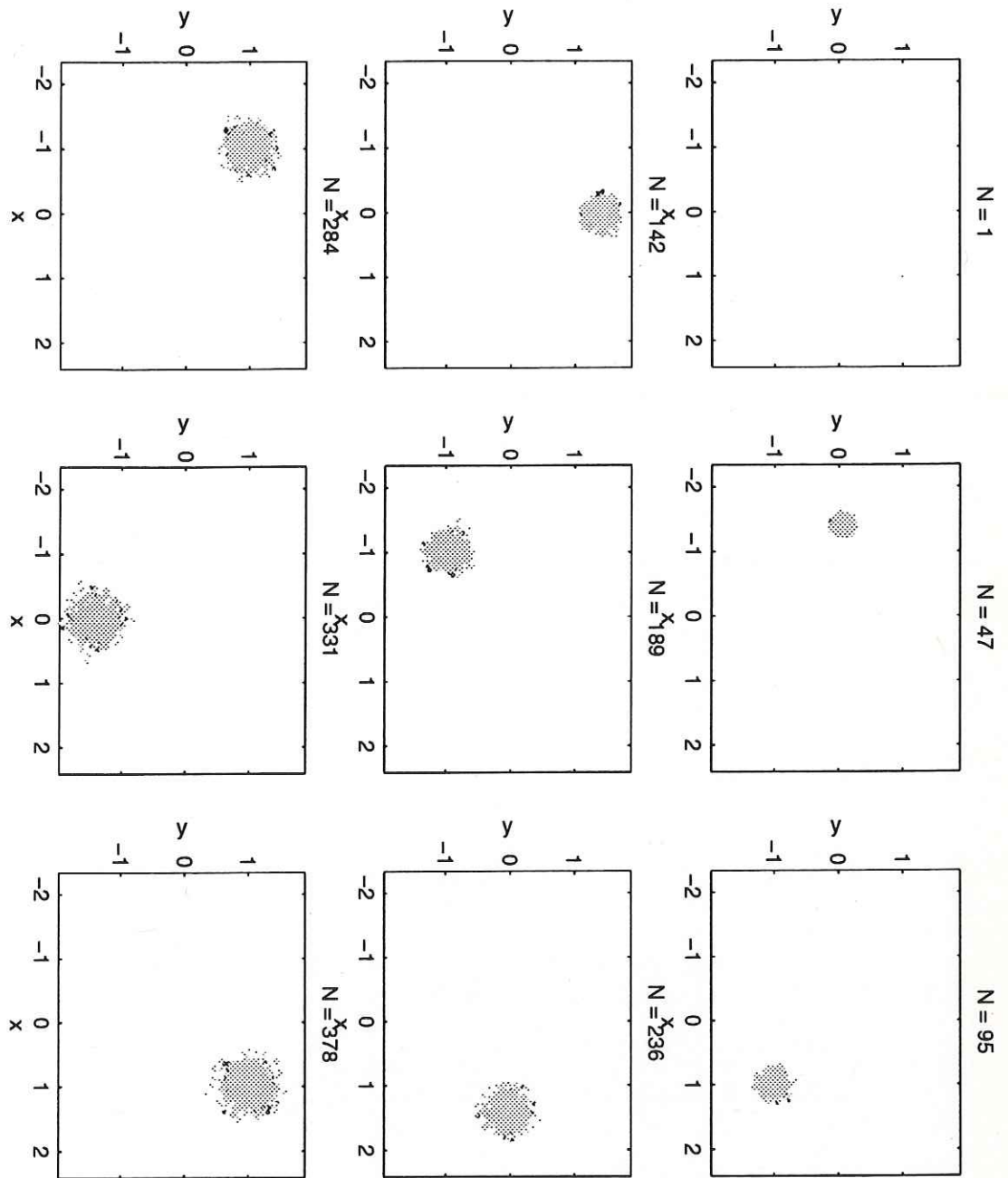


Fig. 7. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice rotacional con condición inicial Ib, $f_{ua} = 0.1$ y $\Omega = 1$.

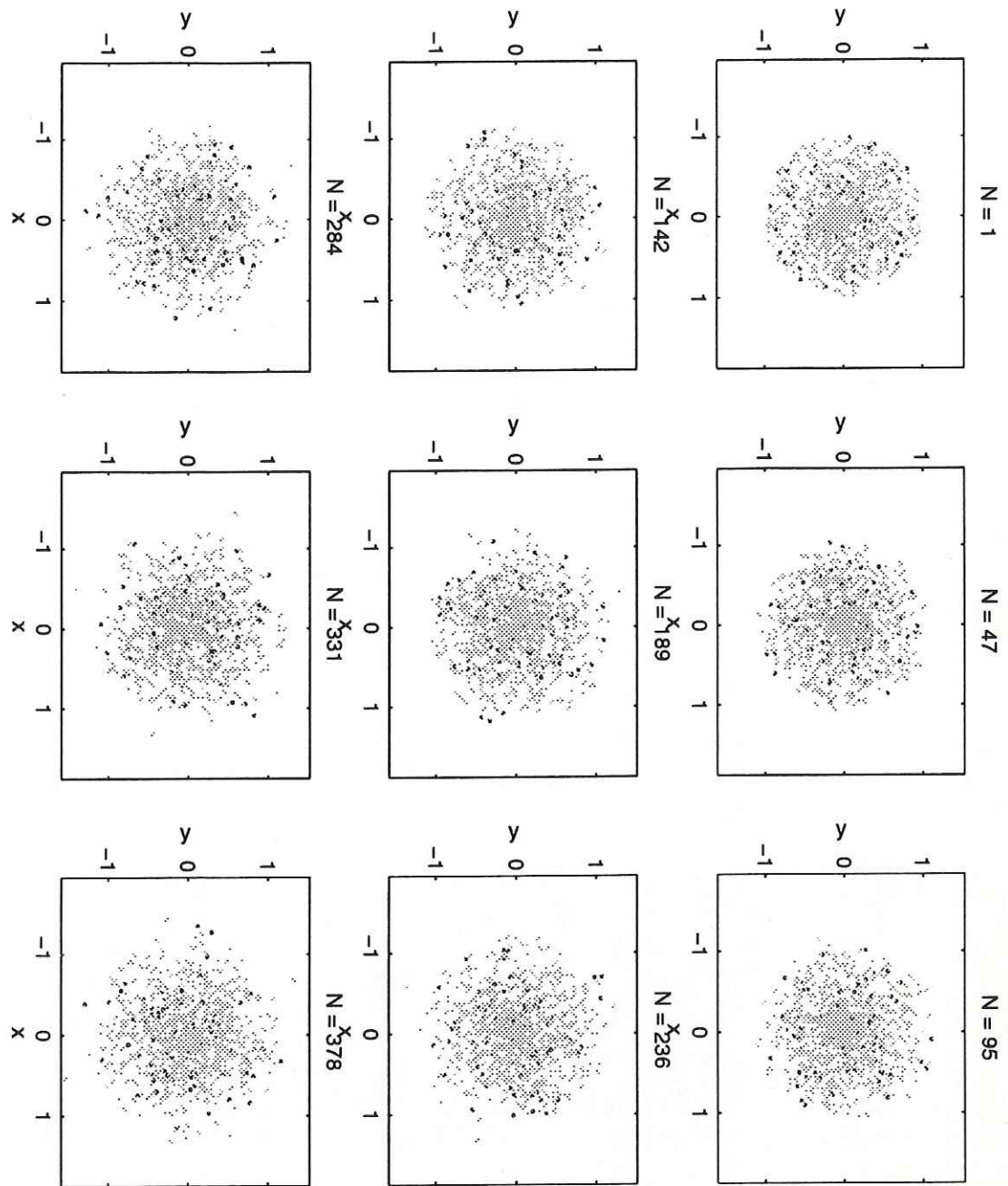


Fig. 8. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice rotacional con condición inicial Πa , $f_{ua} = 0.1$ y $\Omega = 1$.

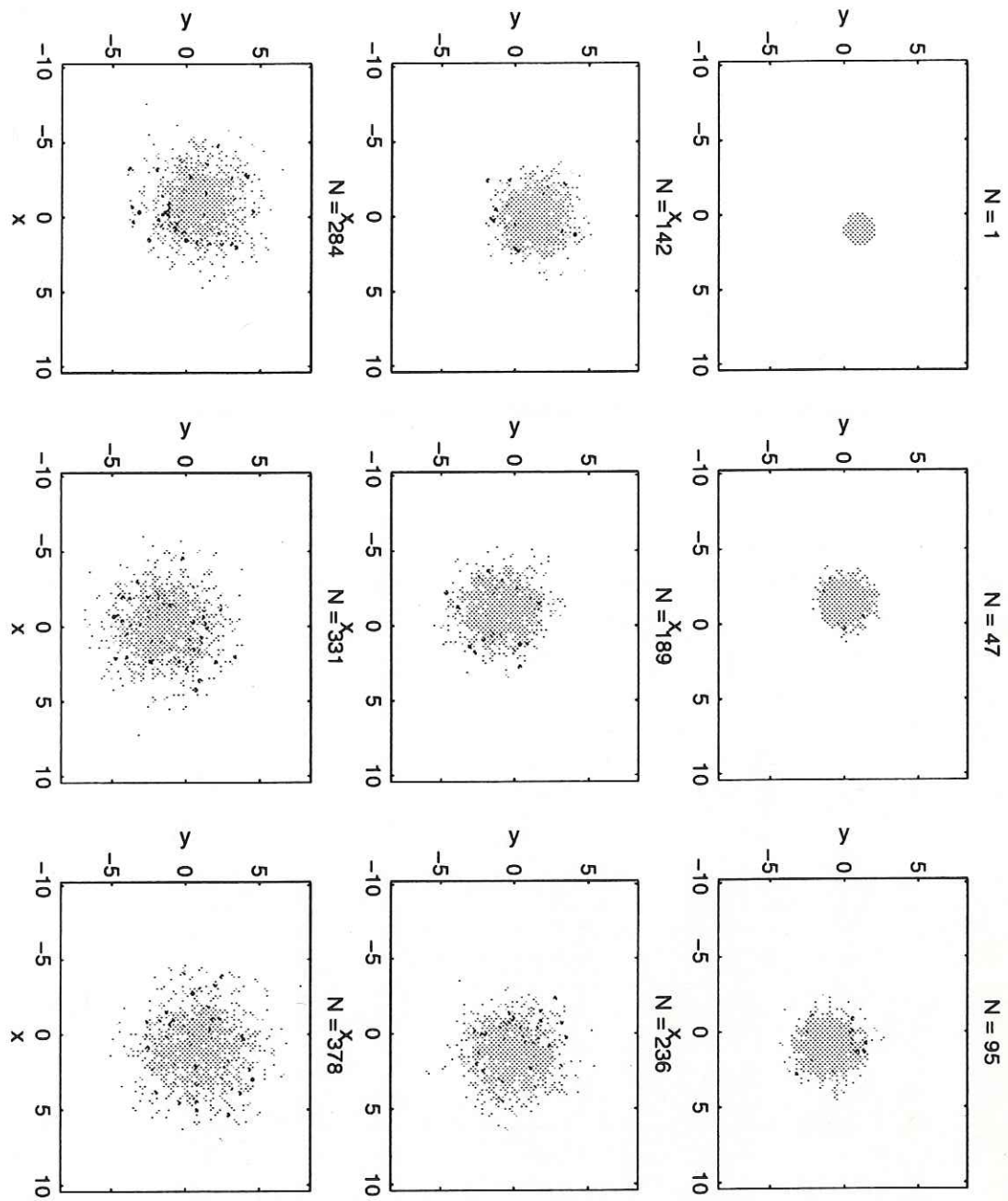


Fig. 9. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice rotacional con condición inicial IIb, $f_{ua} = 1$ y $\Omega = 1$.

Dispersión en un vórtice irrotacional. Como el comportamiento de este tipo de vórtice es contrario al exhibido por un vórtice rotacional, R_{lim} representa ahora el límite a partir del cual domina $\vec{u}_a$ sobre $\vec{u}_d$ para todas las partículas que se encuentran a una distancia $r > R_{lim}$ del centro del vórtice. Al hacer un desarrollo análogo al realizado para hallar el radio R_{lim} correspondiente a un vórtice rotacional, y tomando en cuenta que ahora $\vec{u}_d$ está descrita por la Ec. (51), se llega a:

$$R_{lim} = \frac{\Gamma}{2\pi\sqrt{2}f_{ua}} \quad (62)$$

y, puesto que $\Gamma = 1$, R_{lim} toma los valores de 0.011, 0.112 y 1.125 cuando f_{ua} es igual a 10.0, 1.0 y 0.1, respectivamente.

Debido a que en un vórtice irrotacional $\vec{u}_d$ es inversamente proporcional a r , los valores más elevados de la velocidad tangencial, u_θ , se presentan en la región más cercana al centro de vórtice —del orden de 1.5 para $r = 0.1$; en tanto que, para $r = 1.0$, se sitúan en una unidad de orden menor (alrededor de 0.15)— y ocasionan que, desde un inicio, las partículas sean lanzadas hacia fuera de dicho centro sin importar la condición inicial elegida, de entre aquellas descritas en el método (Fig. 10, 11 y 12). Por ejemplo, si se elige la condición inicial IIa con $f_{ua} = 0.1$, las partículas se distribuyen alrededor del centro del vórtice, formando un anillo (Fig. 11), y sólo unas cuantas partículas permanecen cerca de este centro, atrapadas por los elevados valores de $\vec{u}_d$; a diferencia de la dispersión en un vórtice rotacional con los mismos parámetros, caso en que la mayor concentración de partículas siempre se encuentra en la región próxima al centro del vórtice.

Dispersión en un vórtice de Rankine. Como el comportamiento de $\vec{u}_d$ dentro del radio R es inverso a su comportamiento fuera de este radio, en este caso debe obtenerse un R_{lim} diferente para cada zona limitada por R . Así, cuando $f_{ua} = 0.1$, se obtienen tres regiones distintas: si $r < 0.14$, la dispersión es dominada por la difusión molecular; si $0.14 < r < \sqrt{2}$, domina $\vec{u}_d$ dada por un vórtice rotacional; si $\sqrt{2} < r < 14.1$, domina $\vec{u}_d$ descrita por un vórtice irrotacional; y si

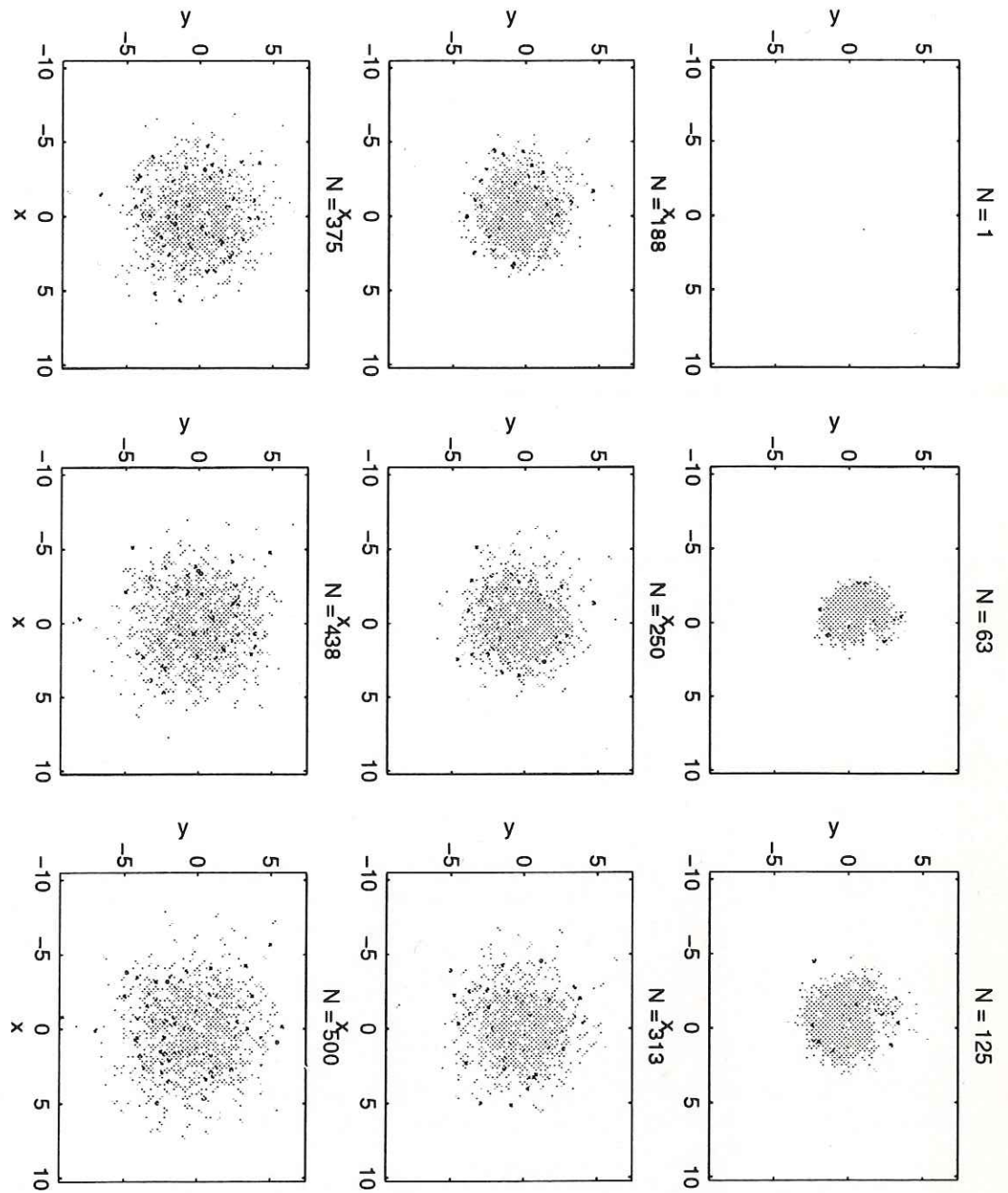


Fig. 10. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice irrotacional con condición inicial Ib, $f_{ua} = 1$ y $\Gamma = 1$.

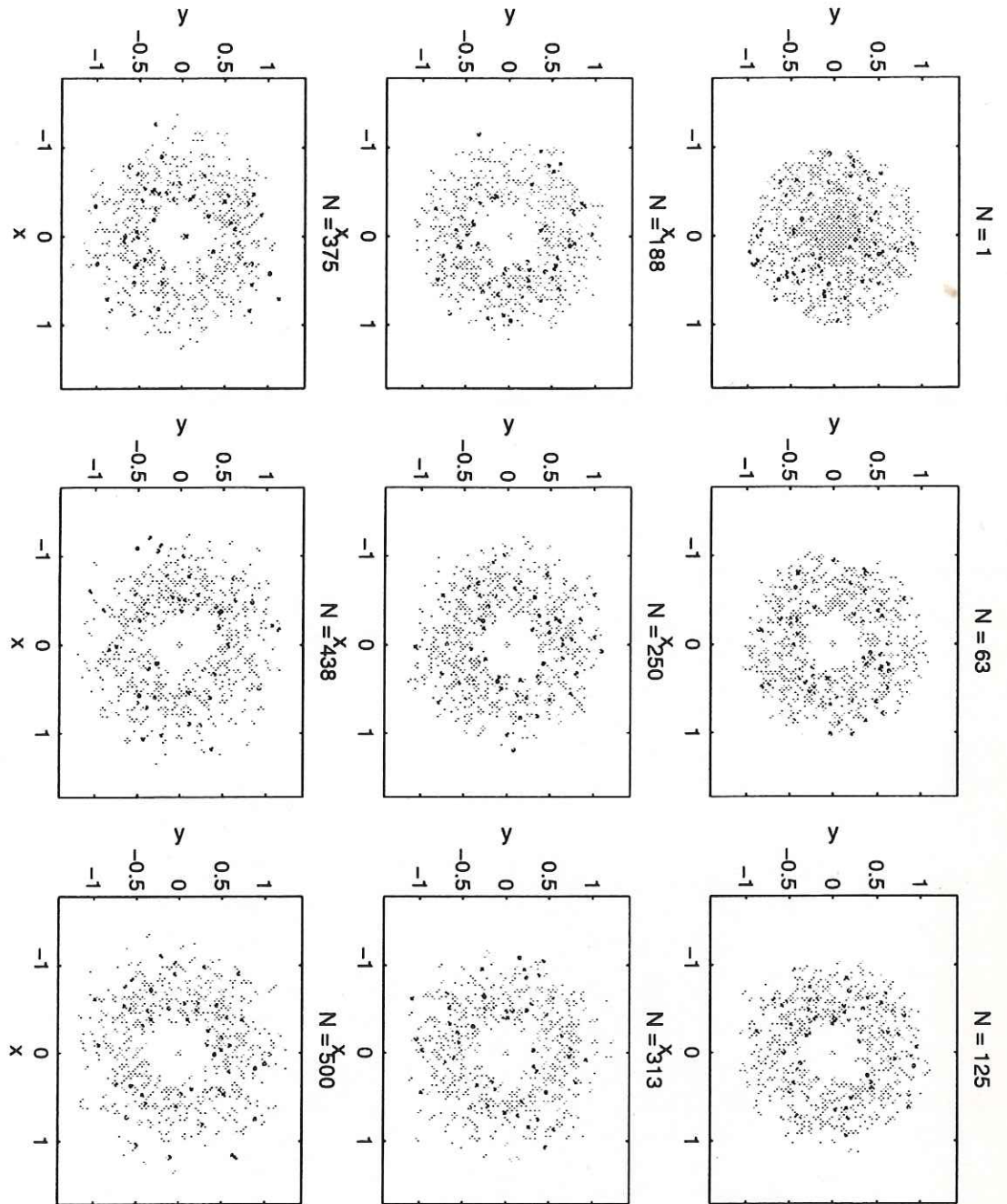


Fig. 11. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice irrotacional con condición inicial Π_a , $f_{ua} = 0.1$ y $\Gamma = 1$

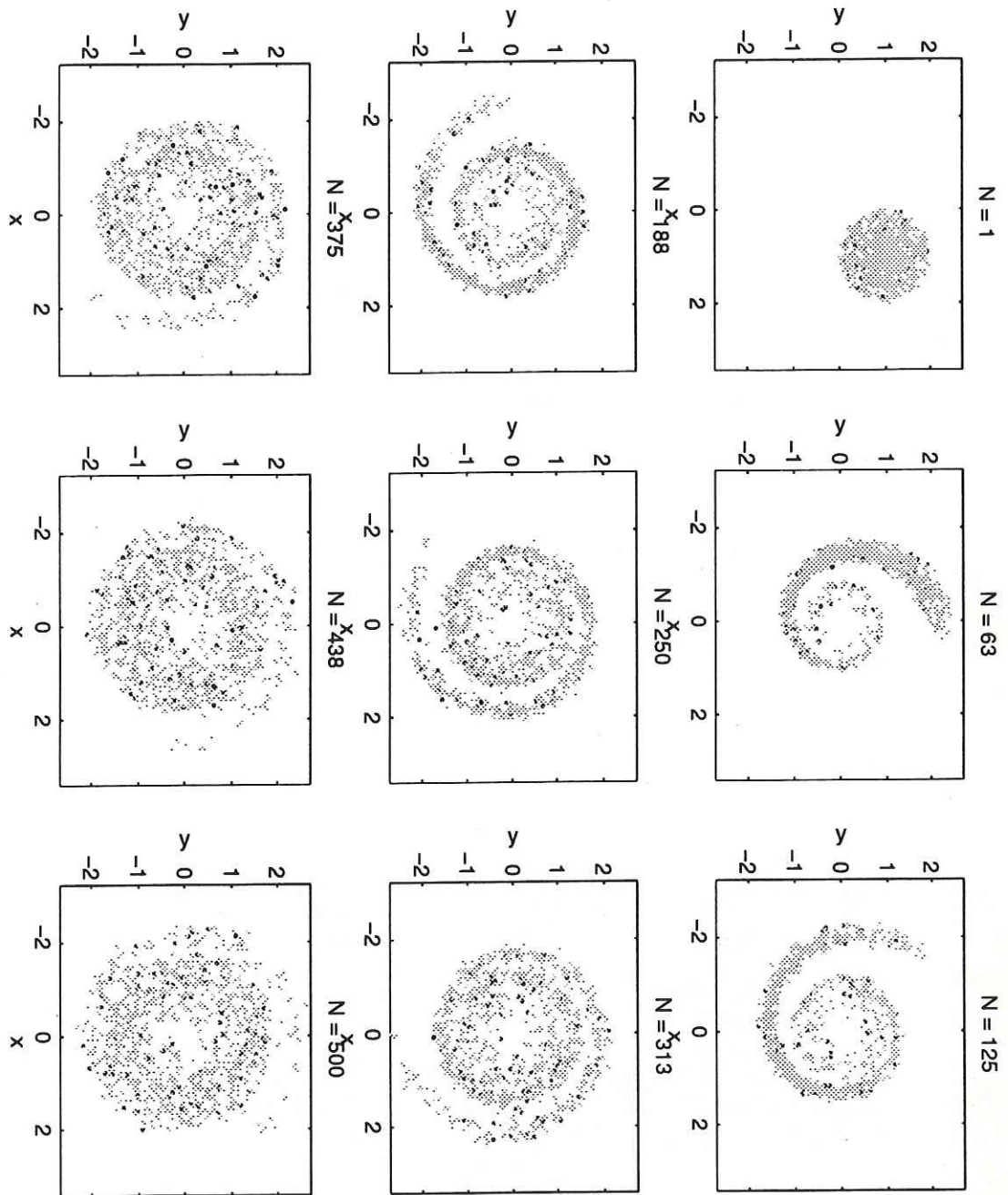


Fig. 12. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice irrotacional con condición inicial IIb, $f_{ua} = 0.1$ y $\Gamma = 1$.

$r > 14.1$, nuevamente domina la difusión molecular. En consecuencia, cuando las partículas comienzan a moverse con la condición inicial Ia (Fig. 13), durante las primeras iteraciones la difusión molecular es la principal responsable de trasladarlas hacia aquellas zonas donde domina la componente determinista, con lo cual la distribución de las partículas es similar a la de un vórtice rotacional y se evita la formación del anillo generado por un vórtice irrotacional.

Si se aplica la condición IIb, con la misma $f_{ua} = 0.1$, ahora aproximadamente la mitad de las partículas se encuentran en la zona en que domina $\vec{u}_d$ generada por un vórtice rotacional, y aproximadamente la otra mitad de las mismas se halla en la zona en la cual la $\vec{u}_d$ descrita por un vórtice irrotacional es quien domina (Fig. 14). Nótese que ninguna partícula está dentro del radio en que domina $\vec{u}_a$. Es bastante apreciable cómo la dispersión de las partículas sujetas a la acción del vórtice rotacional es casi nula comparada a la dispersión de las partículas que se encuentran dentro de un campo de velocidades dado por un vórtice irrotacional, a pesar de que en ambos casos la participación de la difusión molecular es idéntica. Esto posiblemente se debe a que en un vórtice rotacional el fluido se mueve como cuerpo sólido (*i.e.*, es definido como un sistema de partículas tal que las distancias entre ellas permanecen fijas); mientras que en un vórtice irrotacional las partículas ubicadas a mayor distancia del centro del vórtice tienen una velocidad más baja que aquellas localizadas más cerca de dicho centro. En consecuencia, aunque la componente estocástica, $\vec{u}_a$, sea nula, en un vórtice irrotacional (y a diferencia del proceso en un vórtice rotacional) siempre habrá una dispersión de las partículas; no obstante, las trayectorias seguidas por cada una de ellas seguirán estando restringidas a círculos cuyos centros coinciden con el origen del vórtice.

Finalmente, y debido a los valores de Ω y R elegidos en este trabajo para realizar los experimentos numéricos, cuando $f_{ua} \geq 1.0$ el proceso dispersivo en un vórtice de Rankine es dominado en todo punto por la difusión molecular.

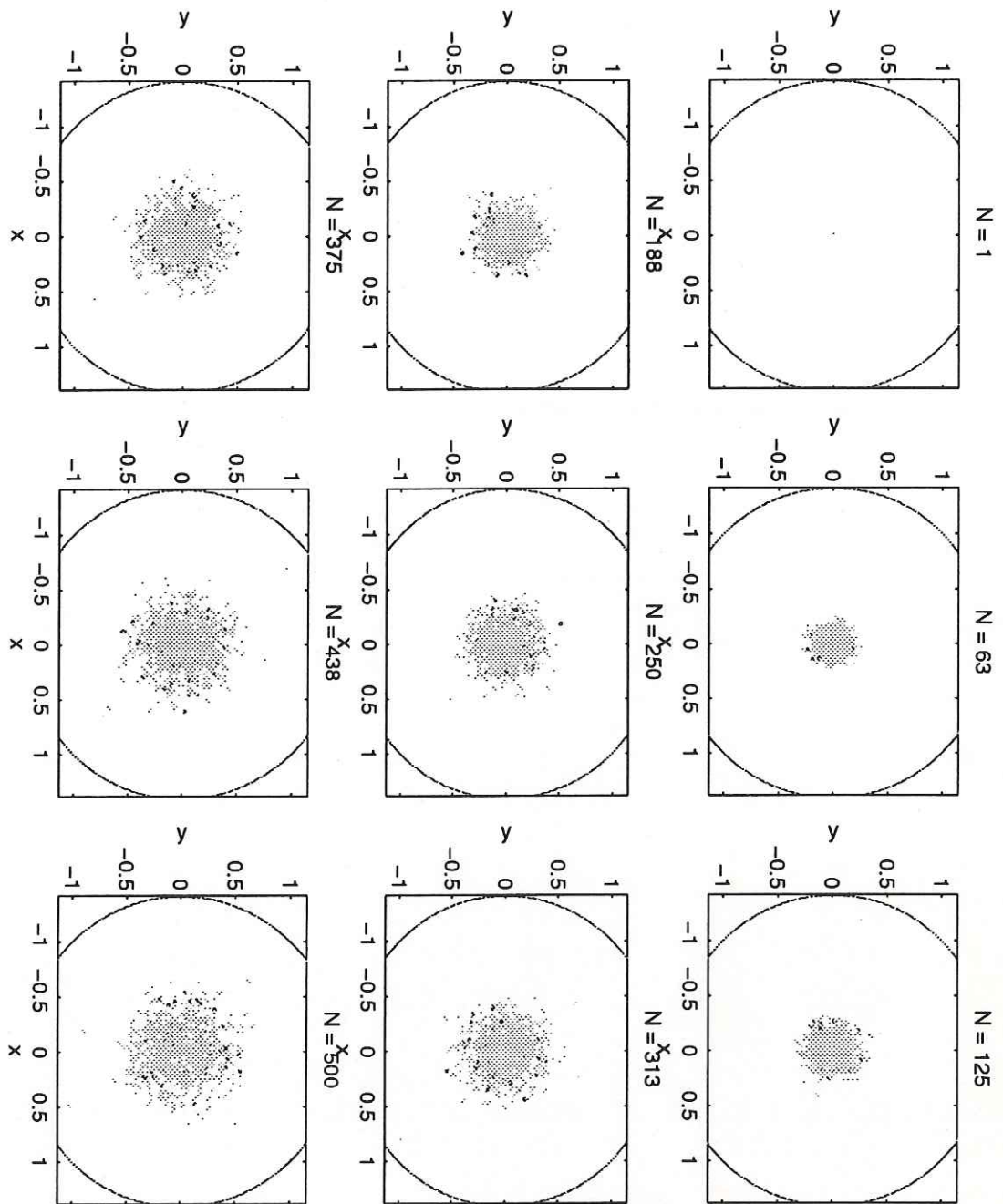


Fig. 13. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice de Rankine con condición inicial Ia, $f_{ua} = 0.1$ y $\Omega = 1$.

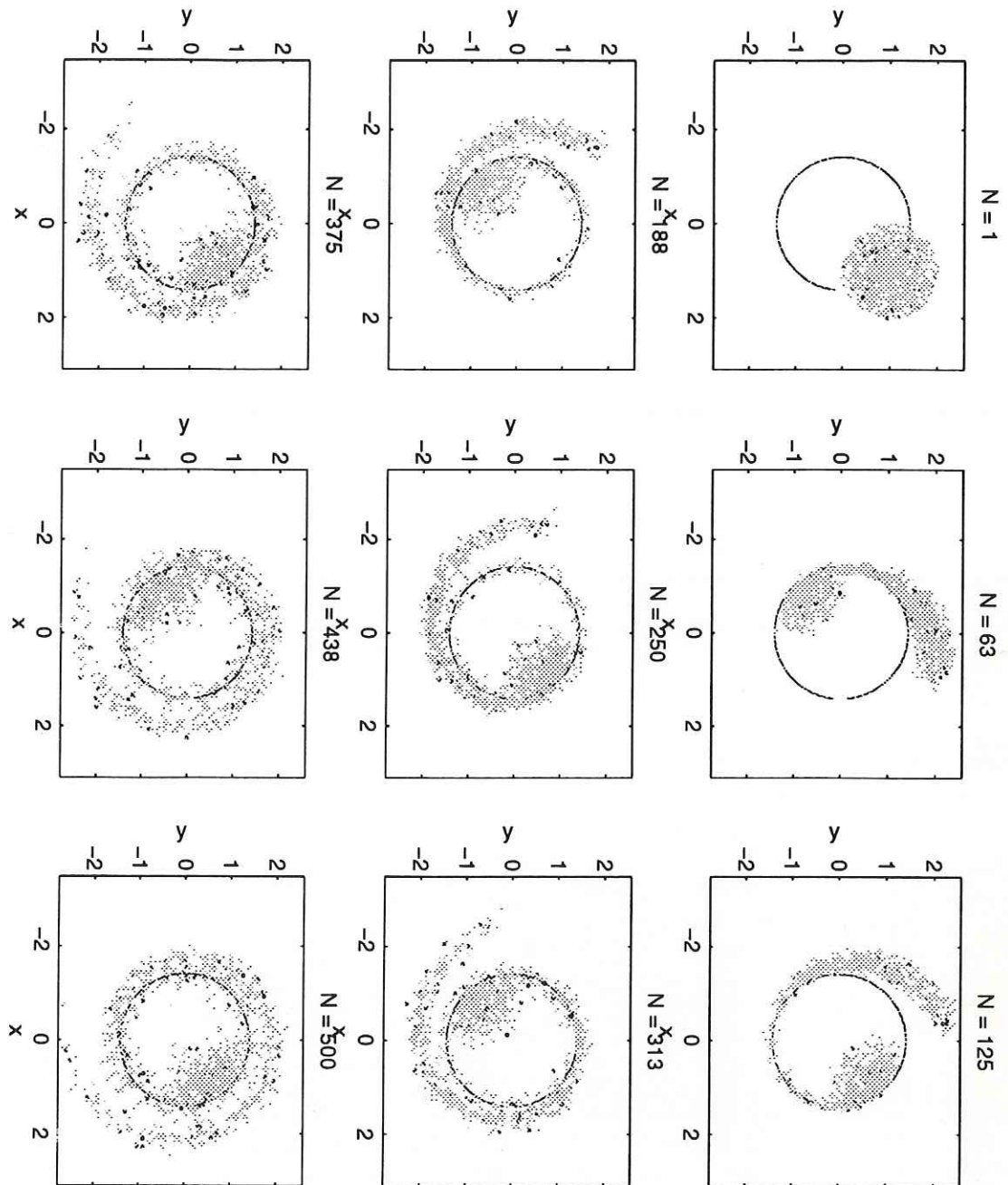


Fig. 14. Como en Fig. 6, pero en el caso de un vórtice de Rankine con condición inicial IIb, $f_{ua} = 0.1$ y $\Omega = 1$.

Comportamiento estadístico de la dispersión en vórtices. Cuando se tiene sólo difusión molecular, la media fluctúa (como era de esperarse teóricamente) alrededor del valor de la posición a partir de la cual comienza la dispersión, en el caso de las condiciones iniciales Ia (Fig. 15) y Ib (Fig. 17); o de la ubicación del centroide de la nube, si se trata de las condiciones iniciales IIa (Fig. 16) y IIb (Fig. 18). La presencia de un vórtice rotacional ocasiona que el comportamiento de la media a lo largo de todo el proceso quede descrito por la función cosenoidal (Graef, 1996, comunicación personal):

$$\langle X(t) \rangle = X_0 e^{i\Omega t}, \quad (63)$$

donde X_0 indica la posición inicial de las partículas. Nótese que si $X_0 = 0$ entonces:

$$\langle X(t) \rangle = 0, \quad (64)$$

y que en las simulaciones no se obtiene este valor exacto porque $\{\vec{u}_a\}$ es distinto de cero, donde $\{ \}$ es el promedio estimado.

Por otro lado, la desviación estándar teórica para un vórtice rotacional es descrita por (Graef, 1996, comunicación personal):

$$\langle |X - X_0 e^{i\Omega t}|^2 \rangle = \frac{4f_{ua}^2 t}{\Omega^2 \Delta t} (1 - \cos(\Omega \Delta t)) \quad (65)$$

y, en ausencia del vórtice (*i.e.*, $\Omega = 0$):

$$\langle |X - X_0|^2 \rangle = 2(f_{ua}^2 \Delta t)t. \quad (66)$$

Para los vórtices irrotacional y de Rankine no es posible encontrar una solución analítica. Además, puesto que el efecto de los vórtices irrotacional y de Rankine disminuye rápidamente conforme aumenta r (a partir de $r > R$, en el último caso), sólo en las primeras iteraciones es posible apreciar la influencia de los mismos en el proceso. En las iteraciones subsecuentes, tanto la media como la desviación estándar tienden a alcanzar un equilibrio cuando domina el efecto del vórtice (Figs. 16a, 17a y 18a).

La difusión molecular, en todas las simulaciones fue la principal responsable de una dispersión más eficiente: la desviación estándar crece rápidamente cuando domina esta componente durante la mayor parte del proceso para la mayoría de las partículas (Figs. 15 a 18). Posiblemente sea ésta la razón de que la presencia de un vórtice irrotacional o de un vórtice de Rankine —a comparación de un vórtice rotacional— haga más eficiente el proceso dispersivo, ya que $\bar{u}_a$ en ambos casos domina durante la mayor parte del proceso, aun para valores de f_{ua} pequeños (v.gr., $f_{ua} = 0.1$, Figs. 16a, 17a y 18a) y, en consecuencia, la desviación estándar alcanza valores notablemente más altos que aquellos generados por un vórtice rotacional con idénticas condiciones iniciales y f_{ua} (Figs. 15 a 18).

Todo parece indicar (Figs. 6 a 9) que el comportamiento de $\bar{u}_d$ en un vórtice rotacional “atrapa” en su giro a las partículas, disminuyendo así el valor de la desviación estándar (Figs. 15 a 18) y, por extensión, la eficiencia de la dispersión. Es posible que por esta razón se observen cambios de los valores de la desviación estándar en un orden de magnitud para cada f_{ua} en un vórtice rotacional; mientras que ello sólo se aprecia en los vórtices irrotacional y de Rankine cuando f_{ua} aumenta de 1 a 10.0.

Nótese que las fluctuaciones de los momentos estadísticos (media y desviación estándar) son mayores cuando la condición inicial es una nube de partículas, comparadas con las fluctuaciones observadas cuando las partículas comienzan a moverse partir de una fuente puntual. Esto es consecuencia de que, cuando las partículas inician su movimiento a partir de una posición distinta para cada una de ellas, la media de cada partícula fluctúa alrededor del valor de su posición inicial (puesto que, debido a que el valor de decisión es igual a 0.5 en todas las simulaciones, las partículas no siguen una dirección preferencial) —aunque, al igual que en el caso en que todas las partículas se dispersan a partir de un punto ubicado en (0,0) ó (1,1), las fluctuaciones se generan alrededor de 0 ó 1, respectivamente, ya que el centroide de la nube también se encuentra en (0,0) ó (1,1)— y, por consiguiente, se generan mayores fluctuaciones tanto en la media como en la desviación estándar calculadas para todas las partículas.

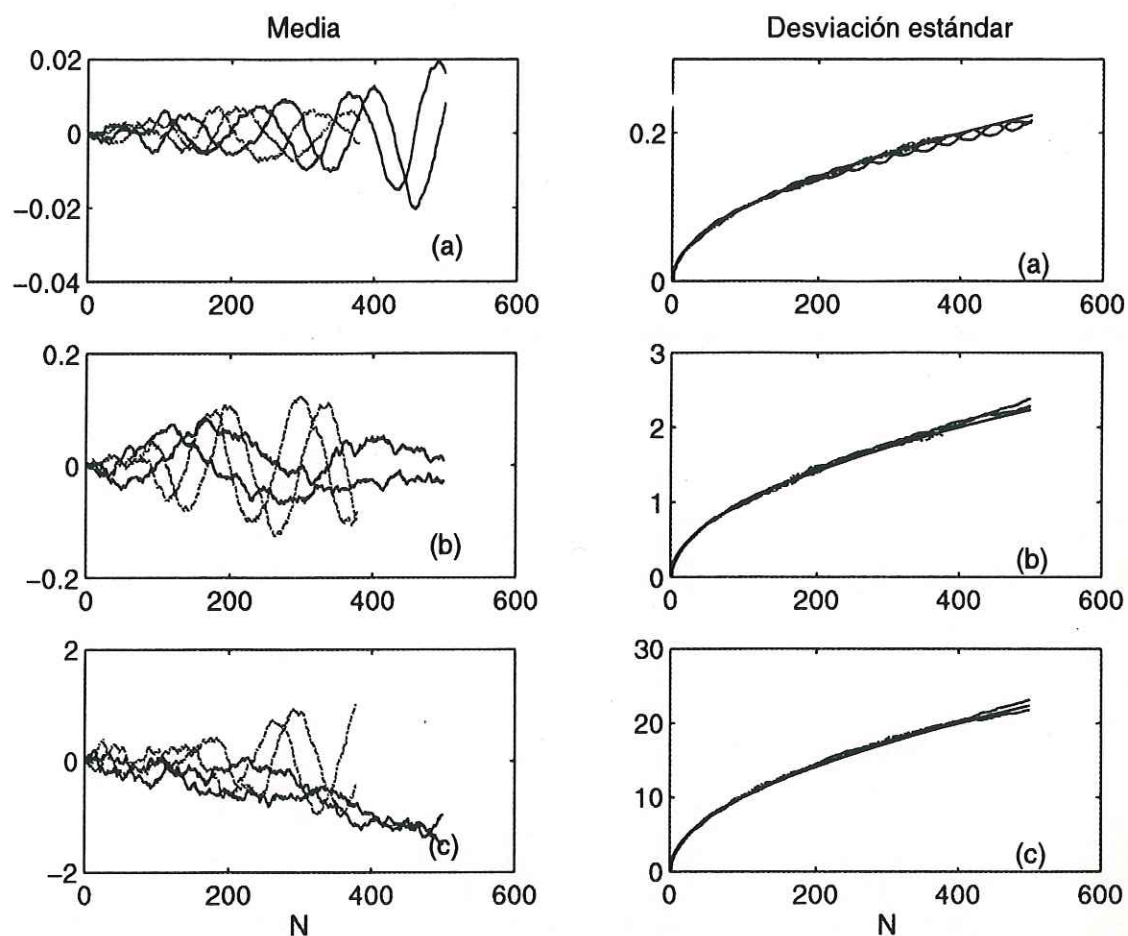


Fig. 15. Media y desviación estándar de cada serie de simulaciones de dispersión de partículas con condición inicial Ia (ver sección VI) y f_{ua} igual a: a) 0.1; b) 1.0; y c) 10.0. Cada gráfica muestra el comportamiento de la media o de la desviación estándar correspondientes a un vórtice: rotacional (línea magenta); irrotacional (línea verde); de Rankine (línea azul); y el comportamiento teórico de la desviación estándar si sólo hay difusión molecular (línea negra).

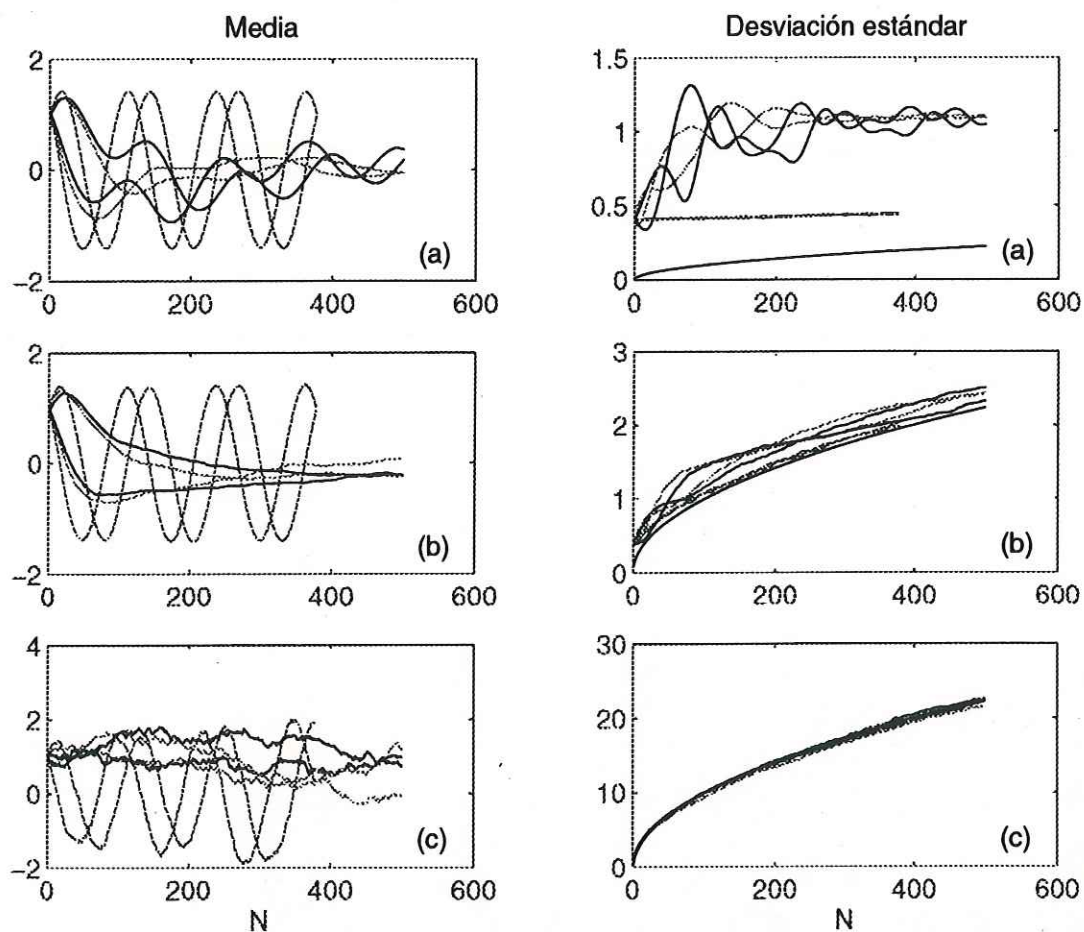


Fig. 16. Como en Fig. 15, pero en el caso de dispersión de partículas con condición inicial Ib.

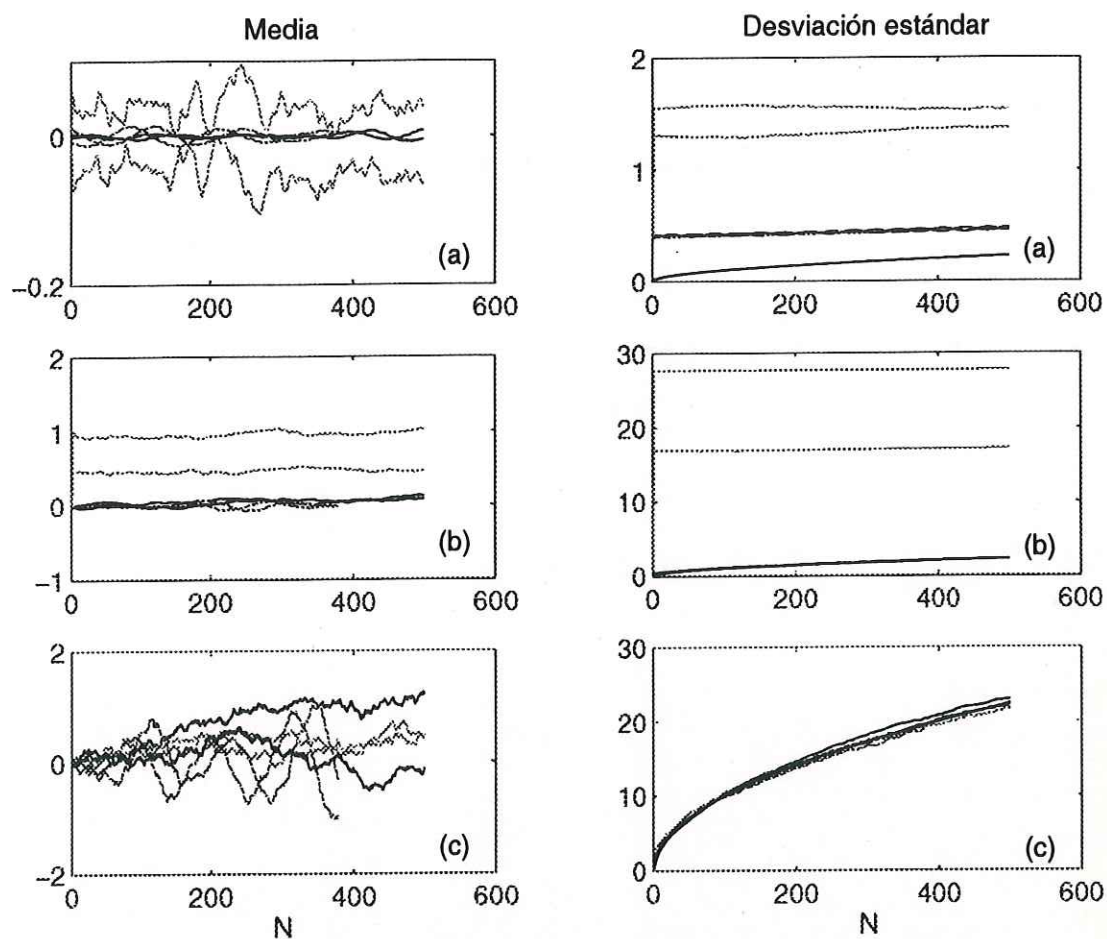


Fig. 17. Como en Fig. 15, pero en el caso de dispersión de partículas con condición inicial IIa.

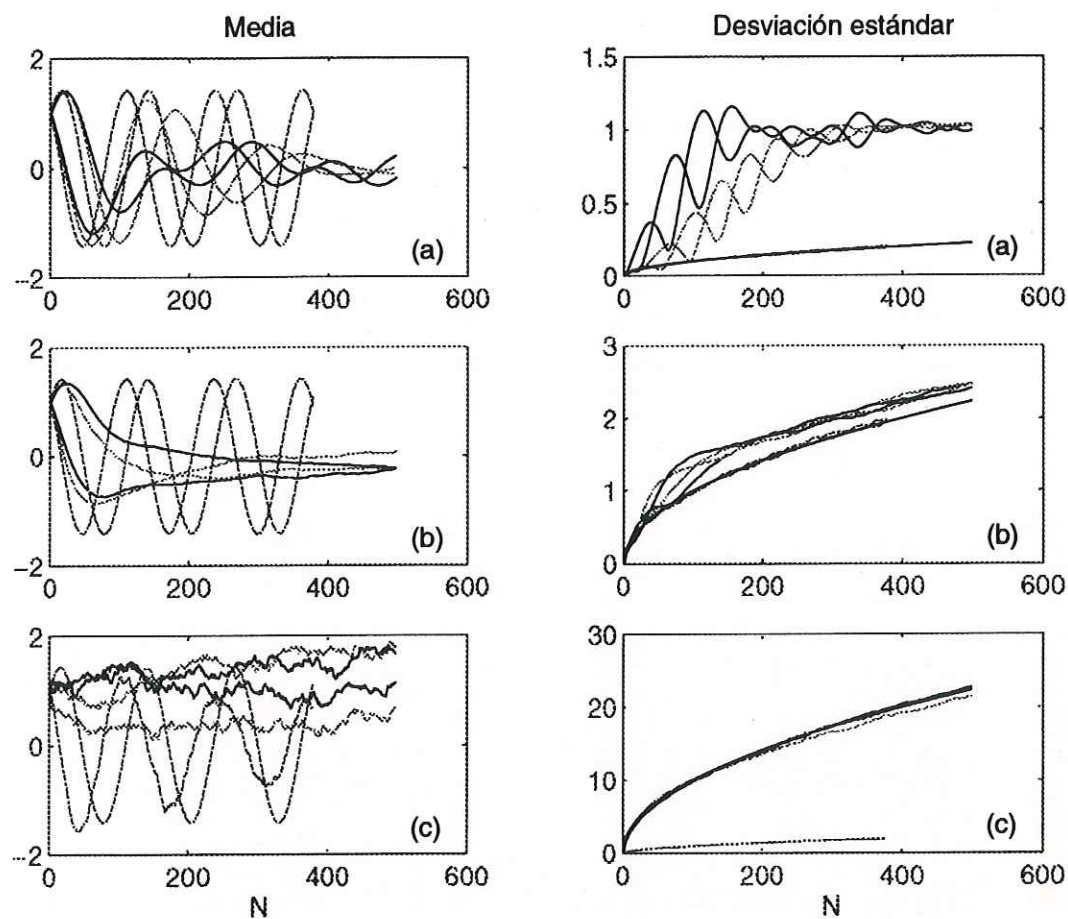


Fig. 18. Como en Fig. 15, pero en el caso de dispersión de partículas con condición inicial IIb.

Efecto de la presencia de un vórtice en la distribución de partículas que se dispersan.

Al simular la dispersión, modelada por medio de una ecuación de tipo Langevin, en presencia de vórtices, se ha estado estudiando un proceso de difusión-advección. En general, dicho proceso está gobernado por una ecuación de la forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla C = D \nabla^2 C \quad (67)$$

que se diferencia de la ecuación que se resuelve en este trabajo (Ec. (14)) por la presencia del término advectivo $\vec{u} \cdot \nabla C$. La velocidad advectiva $\vec{u}$ estaría generada, en el caso específico de las simulaciones realizadas en esta tesis, por la presencia de un vórtice y, por consiguiente, correspondería a la velocidad determinista $\vec{u}_d$.

Nótese que, en los casos de dispersión en un vórtice rotacional con condición inicial: a) Ia, y b) IIa, $\vec{u}_d$ es perpendicular al gradiente de concentración, por lo que $\vec{u} \cdot \nabla C = 0$ y la presencia del vórtice no tiene ningún efecto sobre la dispersión. En consecuencia, y en concordancia con la solución de la ecuación de difusión (Ec. (14)), durante todo el proceso dispersivo:

- a) La estadística se comporta de la forma teóricamente esperada: el promedio fluctúa alrededor de 0 y la desviación estándar varía como $\sqrt{N}$ (Fig. 15);
- b) se obtiene una distribución aproximadamente gaussiana de la posición de las partículas (Fig. 19).

En todas las simulaciones cuya condición inicial es distinta a las condiciones Ia y IIa, $\vec{u}_d$ no es perpendicular a ∇C , por lo que $\vec{u} \cdot \nabla C$ es distinto de cero y ello significa que el vórtice influye en el proceso dispersivo. Uno de los efectos más notables debido a la presencia del vórtice es que ahora la distribución de las partículas ya no es de tipo gaussiana, lo que se observa principalmente en un vórtice irrotacional — a causa, a su vez, de la rápida variación, comparada

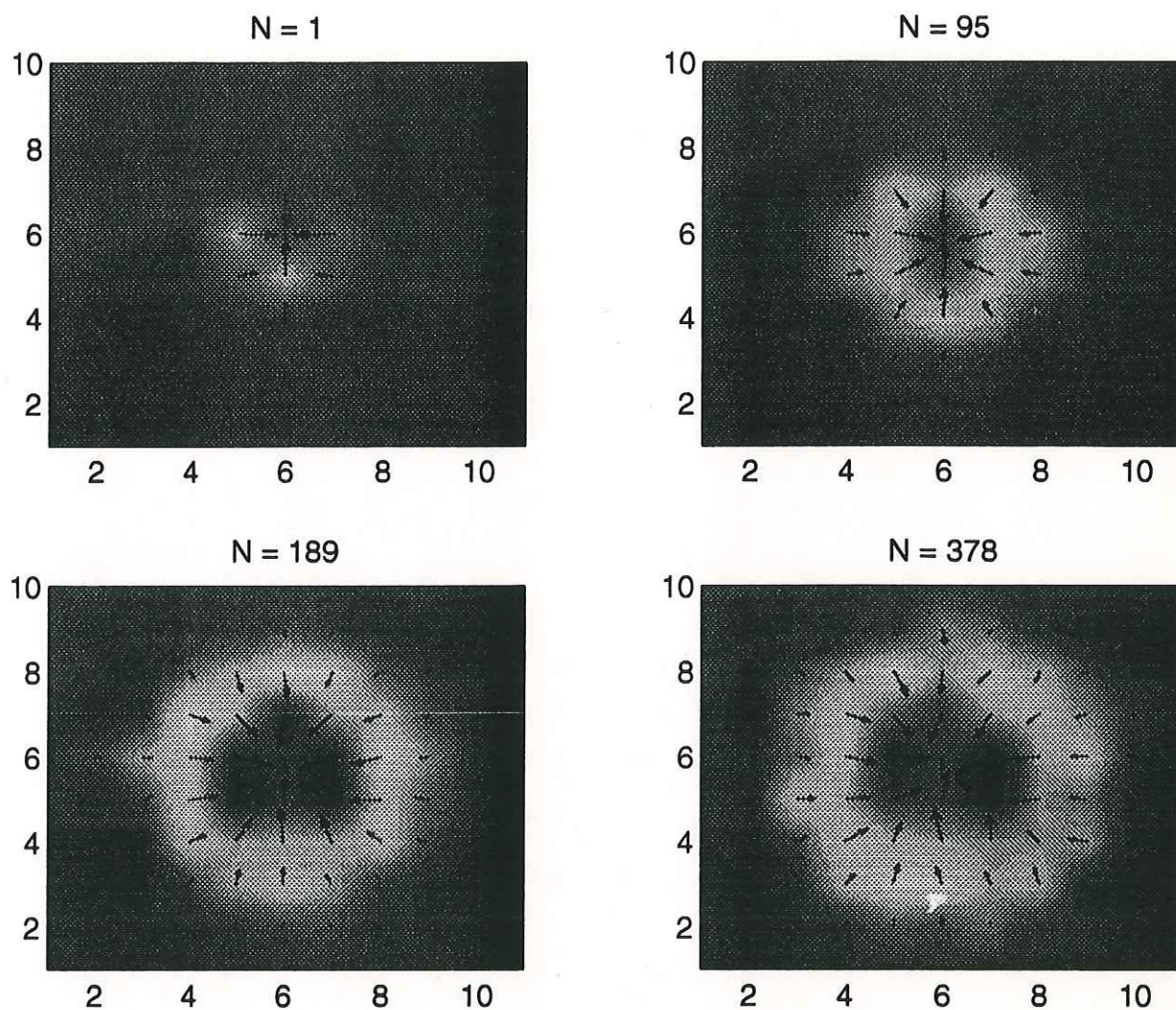


Fig. 19. Gradiente de concentración exhibido, para cada número N de iteraciones, durante un proceso de dispersión de partículas en un vórtice rotacional con $\Omega = 1$ y condición inicial Ia. Las flechas indican la dirección del gradiente; la intensidad del color es directamente proporcional a la concentración de partículas.

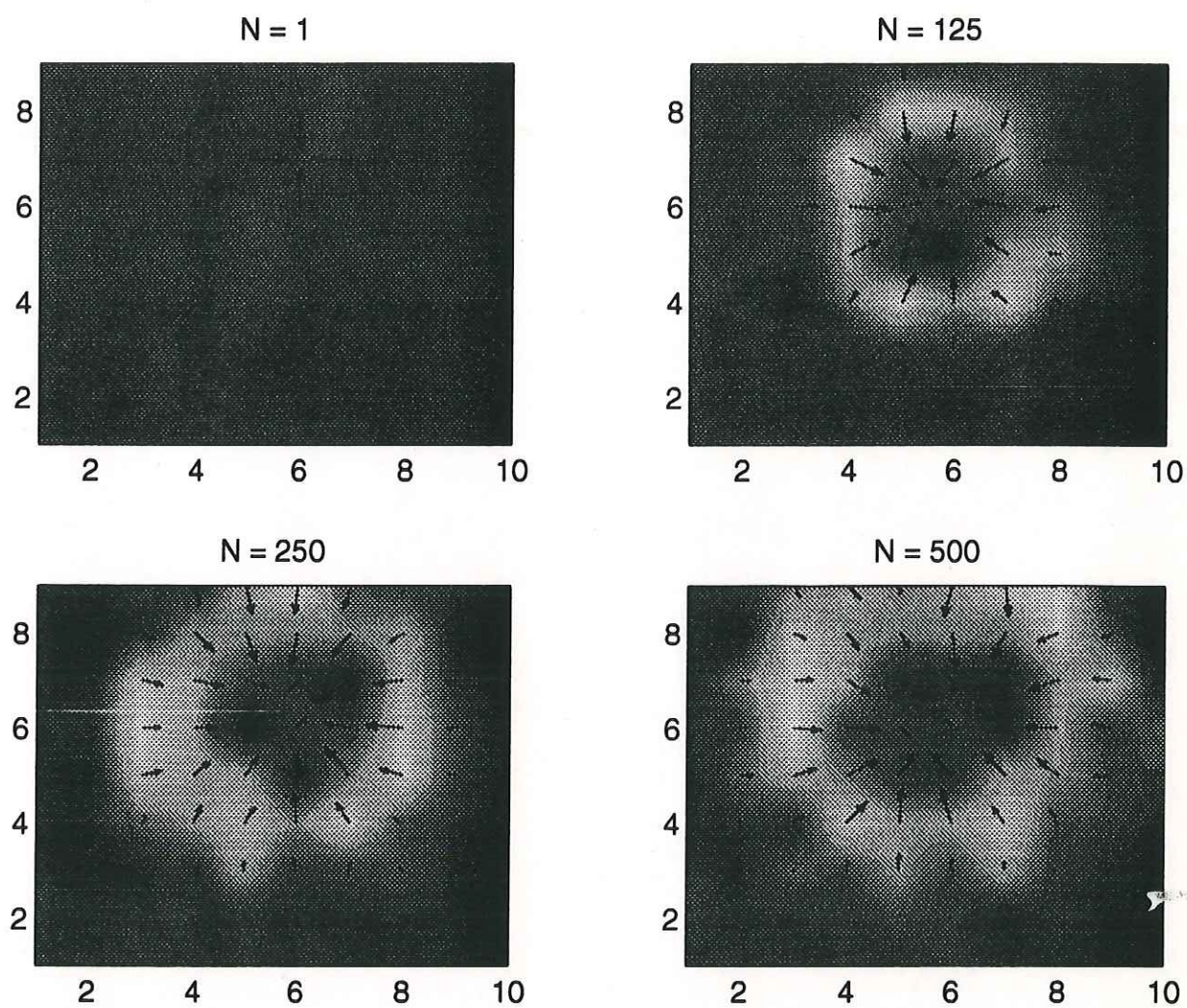


Fig. 20. Como en Fig. 19, pero en el caso de un vórtice irrotacional con $\Gamma = 1$ y condición inicial Ib.

con la que se tiene en los vórtices restantes, de $\vec{u}_d$ con respecto a r en este tipo de vórtice— (Fig. 20).

V. 2. Evaluación de la eficacia de la técnica de caminata aleatoria y de la ecuación de Langevin

La principal ventaja de utilizar una ecuación de tipo Langevin es que permite modelar todo proceso dispersivo, sin restricciones con respecto al fenómeno físico que provoca la parte advectiva del mismo; es decir, aunque en este trabajo $\vec{u}_d$ se encuentra descrita por las ecuaciones de un vórtice, fácilmente puede elegirse cualquier otro fenómeno de aquellos que constituyen una componente advectiva en un medio fluido: corrientes, ciclos de mareas, flujos turbulentos, etc. Por ejemplo, si se escoge que $\vec{u}_d$ esté definida por una corriente unidireccional, la ecuación de tipo Langevin resultante será la suma de la velocidad aleatoria $\vec{u}_d$ más una constante cuyo valor y signo indican la magnitud y sentido de dicha corriente, respectivamente.

V. 3. Evaluación de la eficacia del esquema numérico utilizado

El método numérico elegido para resolver la ecuación de tipo Langevin fue el de diferencias finitas. En un principio, las ecuaciones que gobiernan el comportamiento de cada tipo de vórtice fueron resueltas dentro de un esquema de primer nivel (diferencias finitas hacia adelante). El análisis de estabilidad del mismo indicaba que, con este tipo de esquema, la solución era incondicionalmente inestable. Al aplicar un esquema implícito se solucionaba este problema, pero ahora la solución era incondicionalmente estable; sin embargo, quedaba aún el problema de que esta solución era disipativa: existía un error numérico que iba creciendo conforme aumentaba el número de iteraciones de cálculo, por una parte; y por otra su magnitud también estaba en función del intervalo de tiempo Δt empleado. Por tanto, tenían que utilizarse Δt muy pequeños para asegurarse de que el error numérico fuera a su vez tan pequeño (del orden de décimas o centésimas) que pudiese despreciarse.

En términos prácticos y factibles de observar gráficamente, el que la solución numérica fuera incondicionalmente inestable o estable implicaba que, en ausencia de difusión, la trayectoria resultante de las partículas era una espiral que crecía hacia afuera (esquema explícito) o hacia adentro (esquema implícito) del centro del vórtice; este resultado no coincide con la solución analítica (Ec. (48)), que es un círculo.

Para asegurarse de que la solución, por lo menos cuando $\vec{u}_a = 0$, fuera tanto estable como no disipativa, se utilizó un esquema de segundo nivel ("salto de rana"). El análisis de estabilidad del mismo mostró que la solución es neutral y que el esquema es estable si $\Omega\Delta t < 1$, lo que ocurre siempre en el caso de dispersión en vórtice rotacional (ya que Ω es una constante igual a 1 y $\Omega\Delta t = 0.05$). Para el caso de la dispersión en vórtices irrotacional y de Rankine (en los que Ω ya no es constante), con $f_{ua} < 10$ se cumplía siempre la condición de estabilidad, y únicamente cuando $f_{ua} = 10$ una fracción menor que 1% de los cálculos realizados para determinar la posición de toda partícula en cada iteración presenta inestabilidad; ésto representa un porcentaje de partículas aún más bajo, si se toma en cuenta que esta fracción puede referirse a una cuantas partículas repetidas, e incluso a una sólo partícula, que no cumplen la condición de estabilidad.

Una vez que fue aplicado un esquema neutral, con lo que se mantuvo el error numérico en cero, para evitar inestabilidades de la solución en los experimentos realizados se eligió un Δt muy pequeño (igual a 0.05, dado que, de acuerdo con el análisis de estabilidad la solución lo es para $\Omega\Delta t < 1$ y Ω fue igual o menor que 1 en todos los casos). El valor tan pequeño del Δt utilizado representó una de las principales limitantes para simular la difusión durante tiempos lo suficientemente grandes para alcanzar la escala de tiempo hidrodinámico T descrita por Braun (1984), en la que la distribución de las partículas en el espacio es uniforme, y se llega a un estado de equilibrio; aunque cierta evidencia de ésto es mostrada por el comportamiento estadístico de algunas simulaciones (Figs. 16a a 18a).

A pesar de que el tamaño de las matrices en los experimentos numéricos es grande (de hasta 500×1000 elementos), este tamaño es todavía cómodo de manipular en términos de tiempo

de cálculo de las operaciones matriciales realizadas. Se decidió fijar en 1000 el número de partículas que se dispersaban en los experimentos numéricos. Este número tiene un valor comparable a aquellos valores empleados por Sullivan (1971) y Thompson (1971) para simular difusión longitudinal dentro de un flujo con corte (simulación con 5000 partículas) y difusión turbulenta en la atmósfera (simulación con 1000 partículas), respectivamente; sin embargo, este valor es mucho menor a aquel utilizado por Allen (1982) para simular difusión en estuarios - superior a 20000 partículas-, aunque debe mencionarse que este trabajo tiene por fin la comprensión de la física involucrada en el fenómeno simulado, y no la reproducción de casos reales con la mayor exactitud posible como en el caso de Allen (1982). En esta tesis no se contaba con mediciones reales con las cuales comparar los resultados experimentales y poder determinar la exactitud con la que el modelo simula el fenómeno.

Por ser una primera aproximación, se establecieron *a priori* una serie de consideraciones con el fin de simplificar en lo posible la simulación, y que en un caso real necesariamente tienen que ser tomadas en cuenta. Principalmente se estableció que existía conservación de masa, no se consideraron pérdidas por ninguno de los factores mencionados por Hunter (1980a), entre los que destacan: evaporación, disolución, hundimiento y degradación de las partículas; factores cuya influencia es ejercida en mayor o menor grado en función de la naturaleza de la sustancia difusiva (aceite, sedimento, materia orgánica, plancton, etc.) y para diferentes escalas de tiempo en el rango de horas a años.

Por último, la introducción de variable compleja para resolver las ecuaciones que describen la dispersión representa una reducción apreciable tanto del tiempo de cálculo necesario para simular el fenómeno, como del espacio de memoria ocupado por las matrices de tamaño $N \times n$ (espacio que, de entrada, se reduce a la mitad ya que, por ejemplo, ahora sólo se tiene una matriz de velocidades aleatorias U_a , en vez de dos matrices de componentes de velocidad aleatoria (u_a, v_a)), además de que simplifica notablemente el manejo de las ecuaciones involucradas y de sus correspondientes soluciones numéricas.

VI. CONCLUSIONES

1. La difusión molecular ocasiona una mayor dispersión (estimada a partir de los valores de la desviación estándar alcanzados cuando domina esta componente) de partículas en un vórtice, comparada con la dispersión obtenida al dominar este último.

2. En todas las simulaciones, el campo de velocidades debido a un vórtice irrotacional genera la mayor dispersión de las partículas, en relación a aquella producida por los vórtices rotacional y de Rankine.

3. La presencia de un vórtice de tipo rotacional, cuando las partículas comienzan a dispersarse a partir de una fuente —sea ésta puntual o una nube— cuya localización coincide con el centro del vórtice, no afecta al proceso de dispersión. En este caso, todo el proceso es descrito por la ecuación de difusión molecular.

VII. LITERATURA CITADA

Allen, C.M. 1982. Numerical simulation of contaminant dispersion in estuary flows, *Proc. R. Soc. Lond. A* **381**, 179-194.

Borg, R.J. y G.J. Dienes. 1980. *An Introduction to Solid State Diffusion*, Academic Press, Boston, 360 p.

Braun, E. 1984. Movimiento browniano, *Ciencia*, **35**, 97-116.

Crank, J. 1975. *The Mathematics of Diffusion*, Oxford Univ. Press, London, 414 p.

Csanady, G.T.. 1980. *Turbulent Diffusion in the Environment*, D. Reidel Publishing Company, London, 248 p.

Chandrasekhar, S. 1943. Stochastic problems in Physics and Astronomy, *Rev. Mod. Phys.* **15** (1), 1-89.

Flierl, G.R. 1984. Rossby wave radiation from a strongly nonlinear warm eddy, *J. Phys. Ocean.* **14**, 47-58.

Godínez-Sandoval, V.M.. 1986. Dispersión frente a la costa de Rosarito. *Tesis de Licenciatura*. Facultad de Ciencias Marinas, Universidad Autónoma de Baja California, 69 p.

Hunter, J.R. 1980a. An interactive computer model of oil slick motion, *Oceanology International* **80**, 42-50.

Hunter, J.R. 1980b. The use of particle tracking techniques in physical oceanography. En: Linden, P.F. y Simpson, J.H. 1981. *Physical oceanography of the European shelf seas: a report on*

the Geophysical Fluid Mechanics Symposium of the E.G.S. (1980). *Geophys. Astrophys. Fluid Dyn.* 17, 319-329.

Kundu, P.. 1990. *Fluid Mechanics*. Academic Press, New York, 638 p.

Olson, D.B., R.W. Schmitt, M. Kennelly y T.M. Joyce. 1985. A two-layer diagnostic model of the long-term physical evolution of warm-core, *J. Geophys. Res.* 90(C5), 8813-8822.

Sullivan, P.J. 1971. Longitudinal dispersion within a two-dimensional turbulent shear flow, *J. Fluid Mech.* 49, 551-576.

Thompson, R. 1971. Numeric calculation of turbulent diffusion, *Quart. J. R. Met. Soc.* 97, 93-98.

Wilson, J.F., Jr., y W.E. Forrest. 1965. Potomac river time-of-travel measurements. En: Symposium on Diffusion in Oceans and Fresh Waters. (1964). New York, Lamont Geological Observatory of Columbia University, 1-27.