

APLICACIÓN DE LOS AUTÓMATAS DE GAS RETICULAR A LA MODELIZACIÓN AMBIENTAL

M.G. Villagarcía y J.M. Pacheco

Departamento de Matemáticas, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, Campus de Taira, 35017 Las Palmas de Gran Canaria

Los modelos físicos usados generalmente para describir el comportamiento de los vertidos de contaminantes al mar están basados en la resolución de las ecuaciones del transporte mediante las técnicas de cálculo numérico. Esta aproximación se basa en ecuaciones continuas que posteriormente son discretizadas. Ahora bien, si originariamente los entes que forman el sistema son de naturaleza discreta, parece más lógico realizar una modelización discreta de partida en vez de calcular la ecuación continua y posteriormente discretizarla.

Los autómatas de gas reticular son unos modelos cuya idea fundamental consiste en sustituir la descripción molecular por un sistema de “pseudo-partículas” de diámetro nulo que se desplazan sincrónicamente a lo largo de las aristas de una retícula geométrica regular con velocidades predeterminadas [3], [5]. Esta aproximación Lagrangiana permite obtener el comportamiento esperado de la solución de la correspondiente ecuación en derivadas parciales que modeliza el fenómeno.

Las ecuaciones que modelizan los flujos hidrodinámicos comenzaron a simularse mediante autómatas de gas reticular en los años 70, siendo importante la reproducción de comportamiento de la ecuación de Navier Stokes [1]. Posteriormente, se ha utilizado para simular diversos sistemas de reacción-difusión en fluidos y para verificar algunas cuestiones de la física estadística [2], [4].

En 1989, utilizando la hipótesis de caos molecular, se desarrolla la ecuación reticular de Boltzmann, la cual sirve como alternativa a la utilización de ecuaciones microscópicas. De esta forma se trabaja con funciones de distribución de una partícula, que representan medias de conjunto espaciales N_i sobre un número conceptualmente infinito de sistemas equivalentes y que están, por lo tanto, libres de fluctuaciones. Esta ecuación toma la forma

$$N_i(x_i + c_i, t + 1) = N_i(x, t) + \Omega_i(N)$$

En el modelo que se presenta, se ha construido una retícula de Boltzmann destinada a simular una ecuación de reacción-difusión partiendo de que el campo de velocidades del fluido es conocido en cada paso de tiempo esta ecuación representa la evolución física que sufre un contaminante al ser vertido en la costa suponiendo que el fluido es atérmico y newtoniano. En este tipo de modelos físicos, el término de reacción se representa por la degradación bacteriana, que se suele medir mediante el parámetro T_{90} .

Se usa una retícula cuadrada y por lo tanto cada nodo posee b canales ($i = 0, \dots, b-1$) reservándose uno de ellos ($i = 0$) para las partículas con velocidad nula. La dinámica de evolución del sistema viene controlada por tres operadores que representan las diferentes etapas por las que pasan los nodos en cada paso de tiempo, los operadores actúan todos de forma sincrónica en toda la retícula.

El operador de suma efectúa una suma de partículas sobre todos los canales de cada nodo para producir una matriz cuyos elementos se corresponden con el número de partículas presentes en cada nodo de la retícula. El operador de redistribución reparte todas las partículas de un nodo entre sus diferentes canales y lo hace para cada nodo. El de propagación traslada cada partícula a lo largo de la retícula atribuyéndole una velocidad determinada.

Las condiciones iniciales se variaron acorde a los datos de evolución e intensidad de la corriente reinante en la zona que se reprodujo en la modelización, es decir, se cambiaron los coeficientes de difusión y la intensidad y dirección de la corriente. Se usaron condiciones de contorno de tipo capa límite en la frontera con la costa y de mar abierto en el resto de las fronteras; se ha considerado que el vertido es continuo y que la degradación sigue una distribución exponencial. La modelización mediante autómatas de gas reticular permite variar de una forma muy sencilla las condiciones iniciales y de contorno, lo que le otorga una gran ventaja de cálculo. El programa que implementa el autómata de gas reticular se ha realizado en lenguaje C y para poder observar la evolución del sistema en cada paso de tiempo se ha utilizado el software XMEGAWAVE.

En las simulaciones que se presentan, se consideran solamente los vertidos directos al mar desde costa, ya que en primera aproximación se ha desarrollado un modelo bidimensional. Los resultados obtenidos han mostrado la capacidad que tiene el autómata de reproducir el proceso de expansión de un contaminante de acuerdo con la corriente reinante en la zona. La zona simulada está situada cercana a lugares de gran uso de la costa (playa, puerto deportivo, pesca) y por lo tanto es necesario conocer en cada momento los parámetros medioambientales que permitirán el uso de las aguas circundantes; así, se han considerado variaciones de la dirección de la corriente durante la misma simulación y el posible aumento o disminución de la intensidad de la corriente.

Las simulaciones nos han permitido conocer también el tiempo que tarda en llegar la contaminación a estas zonas sensibles y por lo tanto la aproximación mediante autómatas puede ser un arma muy útil para los gestores medioambientales siempre que se posean ordenadores con gran potencia, ya que ello permitiría representar áreas más extensas y realizar los cálculos con mayor rapidez.

- [1] U.B. Frisch, B. Hasslacher y Y. Pomeau, Phys. Rev. Lett., **56** (1986) 1505-1508,
- [2] D.H. Rothman and S. Zaleski, Rev. Mod. Phys., **66** (1994) 1417-1479.
- [3] G.Y. Vichniac, Phys. D, **10D** (1984) 96-116.
- [4] J.R. Weimar, Tesis Doctoral, Université Libre de Bruxelles, Bélgica (1995).
- [5] S. Wolfram, J.Stat.Phys., **45** (1986) 471-526.