



[Comité Académico](#) | [Conferencias](#)
[Comité de Enseñanza](#) | [Comunicaciones](#)
[Comité Organizador](#) |
[Auspicios](#) |

II Congreso Internacional de Matemática Aplicada a la Ingeniería y Enseñanza de la Matemática en Ingeniería

INMAT 2003

15, 16 y 17 de diciembre 2003

Facultad de Ingeniería

Universidad de Buenos Aires

Paseo Colón 850 (1063)

Ciudad Autónoma de Buenos Aires

Argentina

Organizado por:

**Departamento de Matemática, Facultad de Ingeniería, Universidad de
Buenos Aires**

Instituto Argentino de Matemática, CONICET

DIFUSIÓN – CONSUMO DE OXÍGENO EN AGREGADOS ESFÉRICOS DE SUELOS UTILIZANDO EL MÉTODO DE DISCRETIZACIÓN DE LÍNEAS

Adriana María González

Departamento de Matemática. Facultad de Ciencias Exactas, Físico-Químicas y Naturales.
Universidad Nacional de Río Cuarto.
(5800) Campus Universitario. Río Cuarto. Argentina.
e-mail: agonzalez@exa.unrc.edu.ar

Juan Carlos Reginato

Departamento de Física. Facultad de Ciencias Exactas, Físico-Químicas y Naturales.
Universidad Nacional de Río Cuarto.
(5800) Campus Universitario. Río Cuarto. Argentina.
e-mail: jreginato@exa.unrc.edu.ar

Domingo Alberto Tarzia

Departamento de Matemática. Facultad de Ciencias Empresariales.
Universidad Austral.
(2000) Paraguay 1950. Rosario. Argentina.
e-mail: Domingo.Tarzia@fce.austral.edu.ar

Palabras Claves: Difusión, Consumo, Oxígeno, Suelos, Método de Líneas.

Resumen. *Se presenta un modelo de frontera libre que describe la difusión y el consumo de oxígeno en agregados esféricos de suelos y se estudia la convergencia de un algoritmo numérico para aproximar las soluciones de las fases difusiva y de consumo. Tal algoritmo está basado en el método de discretización de líneas. Se determina analíticamente la solución exacta de la etapa estacionaria y se demuestra que dicho estado sólo se alcanza cuando el tiempo tiende a infinito. Bajo ciertas condiciones se realiza una estimación del tiempo de extinción. Para calcular las soluciones de las fases difusiva y de consumo el algoritmo numérico mencionado combina el método shooting, que localiza el movimiento de la frontera libre, con la resolución de una ecuación diferencial ordinaria, que determina la concentración de oxígeno. El programa correspondiente a tal algoritmo se presenta en su versión MATLAB.*

1 DESARROLLO

La respiración es el fenómeno más generalizado en la Biosfera. Si se dejan a un lado los microorganismos anaerobios estrictos todos los seres vivos respiran en contacto con el aire. Las plantas verdes normalmente son aerobias y no

pueden sobrevivir mucho tiempo en condiciones anaerobias.

La producción de cultivos está afectada por la oxigenación insuficiente y la generación de anhídrido carbónico por actividad microbiana de los suelos.

Diversos autores han estudiado los mecanismos de los problemas de aireación en los sistemas de

producción mediante modelos de simulación donde se resuelven ecuaciones diferenciales sobre dominios fijos con variadas condiciones iniciales y de contorno [1,2,3].

Teniendo en cuenta la presencia de agregados de diversas formas en los suelos y su efecto en la transferencia de oxígeno se propone un modelo de difusión-consumo radial en agregados esféricos física y biológicamente homogéneos.

Se describe a continuación el proceso físico que origina un modelo matemático de frontera libre para la difusión y el consumo de oxígeno en un medio esférico [4,5].

Primero se permite difundir el oxígeno en el medio de modo tal que parte de él es absorbido y eliminado del proceso de difusión [4]. La concentración de oxígeno en la superficie fija del medio se mantiene constante. La primera fase continúa hasta alcanzar un estado estacionario en el cual el oxígeno no penetra más lejos dentro del medio (segunda fase). La provisión de oxígeno se corta y la superficie del medio se aísla de manera que no entre ni salga más oxígeno. El medio continúa absorbiendo el oxígeno disponible en su interior y por tanto, la frontera libre que establece una separación entre la zona de concentración positiva y la zona de concentración nula de oxígeno respectivamente, y que marca el ancho de penetración máximo en el caso estacionario, comienza a retroceder hacia la frontera aislada (tercera fase).

El problema consiste en localizar el movimiento de la frontera libre y determinar la distribución de oxígeno en el medio esférico [6].

La ecuación que gobierna la difusión-reacción de un gas en un agregado esférico homogéneo y saturado con agua de radio r_{ag} es la ecuación de

la difusión en coordenadas esféricas con una fuente constante negativa M , y coeficientes de difusión y porosidad D y e respectivamente [1,2,3]; es decir,

$$e C_t = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(D r^2 C_r \right) + M$$

donde $e > 0$ es la porosidad del agregado, $C = C(r,t)$ es la concentración interna de gas transformada en concentración de equilibrio en aire [mol m^{-3}], t es el tiempo [seg], r es la distancia desde el centro de la esfera [m], $D > 0$ es el coeficiente de difusión del gas disuelto en la

solución suelo [$\text{m}^2 \text{seg}^{-1}$] y $M < 0$ es el término de reacción [$\text{mol m}^{-3} \text{seg}^{-1}$].

Los modelos matemáticos para las tres fases del problema planteado son

Etapas Difusiva

Consiste en determinar la concentración transiente $C = C(r,t)$ y la frontera de separación $S = S(t)$ que satisfacen el siguiente problema de frontera libre parabólico

$$\begin{aligned} e C_t &= D \frac{\partial}{\partial r} C_{rr} + \frac{2}{r} C_r \frac{\partial}{\partial r} + M, \quad S(t) \leq r \leq r_{ag}, \quad t > 0; \\ C(r,0) &= C_{ini}, \quad S(0) \leq r \leq r_{ag}; \\ C(r_{ag},t) &= C_{ext}, \quad t > 0; \\ C(S(t),t) &= C_r(S(t),t) = 0, \quad t > 0; \\ S(0) &= b. \end{aligned}$$

Etapas Estacionaria

Consiste en determinar la concentración estacionaria $C = C(r)$ y la frontera libre s que satisfacen el siguiente problema de frontera libre elíptico

$$\begin{aligned} - D \frac{\partial}{\partial r} C' + \frac{2}{r} C' \frac{\partial}{\partial r} &= M, \quad s \leq r \leq r_{ag}; \\ C(r_{ag}) &= C_{ext}; \\ C(s) &= C'(s) = 0. \end{aligned}$$

Etapas de Consumo

Consiste en determinar la concentración transiente $C = C(r,t)$ y la frontera de separación $s = s(t)$ que satisfacen el siguiente problema de frontera libre parabólico

$$\begin{aligned} e C_t &= D \frac{\partial}{\partial r} C_{rr} + \frac{2}{r} C_r \frac{\partial}{\partial r} + M, \quad s(t) \leq r \leq r_{ag}, \quad t > 0; \\ C(r,0) &= C^*(r), \quad s^* \leq r \leq r_{ag}; \\ C_r(r_{ag},t) &= 0, \quad t > 0; \\ C(s(t),t) &= C_r(s(t),t) = 0, \quad t > 0; \\ s(0) &= s^*. \end{aligned}$$

donde $C_{ini} > 0$ es la concentración inicial de gas en la Etapa Difusiva [mol m^{-3}], $C_{ext} > 0$ es la concentración externa de gas en la Etapa Difusiva [mol m^{-3}], $S = S(t)$ es la frontera libre en la Etapa Difusiva [m], $s = s(t)$ es la frontera libre en la Etapa de Consumo [m] y (C^*, s^*) es la solución de la Etapa Estacionaria.

La importancia de los problemas de frontera libre correspondientes a las fases difusiva, estacionaria y de consumo del problema de la difusión y el consumo de oxígeno en un medio esférico radica en su vinculación con el crecimiento de raíces de diferentes cultivos.

Se calcula analíticamente la solución exacta del estado estacionario bajo una adecuada restricción y se estudia la convergencia de un algoritmo numérico para aproximar las soluciones de las fases difusiva y de consumo, mostrando que el procedimiento está bien definido. Tal algoritmo está basado en el método de discretización de líneas. Resultados teóricos justifican la existencia y la unicidad de la solución del problema planteado. Bajo ciertas condiciones se obtiene una estimación del tiempo de extinción. Además, se verifica que el estado estacionario sólo se alcanza cuando el tiempo tiende a infinito.

Para calcular las soluciones de las etapas difusiva y de consumo el algoritmo mencionado combina el método shooting, que localiza el movimiento de la frontera libre, con la resolución de una ecuación diferencial ordinaria, que determina la concentración de oxígeno. Los programas correspondientes a tal algoritmo se implementaron mediante programación en MATLAB [7].

Se muestran algunos valores calculados usando datos experimentales extraídos de la bibliografía [1]. Con el objeto de tener una visión más amplia del desarrollo del proceso, se exponen ciertos gráficos que permiten observar la distribución de oxígeno en el medio esférico y el movimiento de la frontera libre.

En este trabajo se ha considerado un término constante de reacción que está relacionado con altas concentraciones de oxígeno. En [3] se observó que el consumo de oxígeno puede estimarse a través de la cinética de Michaelis-Menten incluyendo o no el efecto inhibitorio del carbono sobre la anaerobiosis lo cual permite trabajar con altas y bajas concentraciones de

oxígeno. Por ello se ha previsto estudiar otros casos en los cuales dicho término depende de la distribución de oxígeno en el medio esférico; esto permitirá establecer ciertas relaciones entre el modelo de frontera libre para la difusión y el consumo de oxígeno propuesto y el modelo agronómico de frontera fija citado en la bibliografía.

Resultados obtenidos por Martínez-Marquina-Donat [8] para el caso unidimensional se generalizan mediante coordenadas esféricas y un término constante de reacción.

2 REFERENCIAS

- [1] **Sierra, J.**, *Etude de l'Anoxie dans les Sols á Structure Agrégée en relation avec la Respiration Microbienne*. Ph. D. Thesis, Université Claude Bernard – Lyon I, France (1994).
- [2] **Renault, P. – Stengel, P.**, *Modelling Oxygen Diffusion in Aggregated Soils: I. Anaerobiosis inside the Aggregates*. Soil Science Society of American Journal, 58 (1994), 4, págs. 1017-23.
- [3] **Sierra, J. – Renault, P.**, *Oxygen Consumption by Soil Microorganisms as affected by Oxygen and Carbon Dioxide Levels*. Applied Soil Ecology, 2 (1995), págs. 175-84.
- [4] **Crank, J.**, *Free and Moving Boundary Problems*. Clarendon Press, Oxford (1984).
- [5] **Tarzia, D.**, *A Bibliography on Free-Moving Boundary Problems for the Heat-Diffusion Equation. The Stefan and Related Problems*. MAT, Nro. 2, Universidad Austral – Rosario (1999), with 5869 references on the subject.
- [6] **González, A.**, *Estudios de Anaerobiosis en Agregados Esféricos de Suelos*. Tesis Magistral, Universidad Nacional de Río Cuarto, Argentina (2001).
- [7] **Hanselman, D. – Littlefield, B.**, *Mastering MATLAB 5. A Comprehensive Tutorial and Reference*. Prentice –Hall, U.S.A. (1998).
- [8] **Martínez, V. – Marquina, A. – Donat, R.**, *Shooting Methods for one-dimensional Diffusion-Absorption Problems*. SIAM Journal on Numerical Analysis, 31 (1994), 2, págs. 572-89.