

03095

6

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

CENTRO DE CIENCIAS DE LA ATMOSFERA
POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA



“MODELACION MATEMATICA Y SIMULACION NUMERICA EN EL CONTROL DE EMISIONES INDUSTRIALES”

298889

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS
(MODELACION MATEMATICA DE SISTEMAS TERRESTRES)
P R E S E N T A :
DAVID PARRA GUEVARA

TUTOR: DR. YURI NIKOLAEVICH SKIBA

MEXICO, D. F.

2001



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

A Isabel y Andrea

Agradecimientos

Deseo expresar mi gratitud a todas aquellas personas que con su apoyo y esfuerzo contribuyeron a la realización de esta tesis. Especialmente agradezco al Comité Doctoral:

Dr. Julián Adem Chahín,
Dr. Víctor M. Mendoza,
Dr. David A. Salas,
Dr. Arturo Quintanar Isaías,
Dr. Yuri N. Skiba,
Dr. Ricardo Berlanga Zubiaga,
Dr. Sergei Bulgakov,

por las sugerencias y comentarios que enriquecieron este trabajo. En particular, deseo expresar la enorme gratitud que tengo para mi tutor, Dr. Yuri Nikolaevich Skiba, por otorgarme conocimientos, tiempo y consejo, además de su constante apoyo durante estos años. Así también, quiero agradecer al Dr. Ricardo Berlanga por su exhaustiva lectura del texto, por su entusiasmo en las horas más negras, y por las numerosas pláticas densas.

Finalmente, agradezco a la DGEP-UNAM por la beca que me concedió para la realización de mis estudios de doctorado, al CCA-UNAM por el apoyo técnico, y a la coordinación del Posgrado en Ciencias de la Tierra por las facilidades que me brindó.

Resumen

Se modela la propagación de contaminantes, primarios y secundarios, emitidos en la atmósfera por varias fuentes industriales, usando la ecuación de transporte bidimensional. Se deriva el modelo diferencial adjunto y un principio de dualidad, los cuales permiten formular restricciones suficientes para las tasas de emisión de cada fuente industrial, con el objetivo de mantener la concentración promedio del contaminante, en una zona de importancia ecológica, por debajo de un valor máximo admisible (norma sanitaria). Se sugieren tres estrategias de control de corto plazo, que se aplican después de que el modelo de dispersión, usando las tasas originales de emisión, ha realizado un pronóstico desfavorable para la concentración promedio del contaminante (primario o secundario). La primera estrategia de control se basa en la minimización de la norma en L_2 de las tasas de emisión de las fuentes contaminantes, sujeta a una ecuación de enlace determinada por el principio de dualidad. La segunda estrategia se deriva de una acotación adecuada del principio de dualidad con base en los valores temporales de la función adjunta. La tercera estrategia aproxima lo más posible, cualitativa y cuantitativamente, las tasas originales de emisión (control óptimo), y usa el principio de dualidad como restricción en el proceso de minimización. Se sugiere también una técnica para generar diversos controles a través de estas estrategias (control convexo). En todos los casos, las estrategias de control se definen en términos de la solución del problema adjunto, y son matemáticamente correctas, es decir, los controles permiten satisfacer la norma sanitaria dentro de la región de importancia ecológica.

Los problemas diferenciales de dispersión y adjunción presentan buenas características matemáticas, como son existencia, unicidad y estabilidad de las soluciones. Para ambos problemas de evolución las soluciones se calculan aplicando el método de separación de operadores componente por componente, luego de haber discretizado espacialmente sobre una malla doble, tipo-C, de Arakawa. Se muestra para este esquema de solución numérica de orden dos, la estabilidad y la convergencia.

Tanto para los modelos diferenciales como para los modelos discretos, se muestra, en forma analítica y por simulación numérica, que se satisface una ecuación de balance de masa que coincide con el fenómeno modelado.

Índice

Resumen	ii
Capítulo 1. Introducción	1
1.1 Contaminación atmosférica	3
1.2 Dispersión de los contaminantes en la atmósfera	6
1.3 Control de emisiones	11
1.3.1 Un modelo simple de control de emisiones	13
Capítulo 2. Modelo de dispersión	18
2.1 Definición del modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos	18
2.2 Unicidad y estabilidad de la solución en el sentido clásico	23
2.3 Existencia, unicidad, y estabilidad de una solución débil	27
2.4 Definición del problema de control de emisiones	33
Capítulo 3. Modelo adjunto de dispersión	35
3.1 Operador adjunto	36
3.2 Derivación del modelo adjunto de dispersión	39
3.3 Principio de dualidad y análisis de sensibilidad	42
3.4 Ejemplos numéricos de dispersión y adjunción	45
Capítulo 4. Control a corto plazo de emisiones industriales	53
4.1 Primera estrategia de control: control en la masa emitida	54
4.2 Segunda estrategia de control: control en la estructura temporal	60
4.3 Tercera estrategia de control: control óptimo	63
4.4 Control por combinaciones lineales convexas	69
4.5 Ejemplos numéricos de control	70
Capítulo 5. Esquema de solución numérica	81
5.1 Esquema de Crank-Nicolson	81
5.2 Separación de operadores componente por componente	85
5.3 Separación de operadores en la ecuación de transporte	89

Capítulo 6. Control de contaminantes secundarios	96
6.1 Modelo de dispersión y su adjunto	98
6.2 Control óptimo	102
6.3 Control para sustancias primarias y secundarias	106
Conclusiones	108
Referencias	111
Apéndice	115

Capítulo 1

Introducción

El fenómeno de la contaminación atmosférica, como un caso particular de la contaminación en cualquier medio natural, es el resultado de una enorme población mundial, con un estilo de vida moderno, que reclama y consume una gran cantidad de bienes y servicios. Debido a esta demanda, la cual ha presentado un constante incremento en las últimas décadas, los diferentes agentes de producción de bienes, y generadores o prestadores de servicios, transforman enormes volúmenes de materias primas y combustibles fósiles, liberando diversos residuos contaminantes a la atmósfera^[9]. El medio ambiente tiene mecanismos para diluir y asimilar estos residuos y reintegrarlos a la naturaleza^[34]; sin embargo, durante el último siglo las diversas actividades antropogénicas emiten a la atmósfera, en intervalos de tiempo cortos, grandes volúmenes de sustancias en zonas reducidas (ciudades, parques industriales, etc.), de tal forma que los mecanismos de asimilación no se dan abasto para reciclar el exceso de sustancias y limpiar la atmósfera. El resultado es la acumulación y permanencia de diferentes contaminantes primarios, propiciando la generación de otras especies secundarias^[34, 45], las cuales al juntarse forman una mezcla que produce diversos daños en los seres humanos y en los ecosistemas^[4].

Cada contaminante atmosférico, en función de la concentración con la cual se presente y su toxicidad, implica diversos problemas de salud pública^[17], que van desde molestias en vías respiratorias y mucosas, en la población en general, hasta un incremento en los decesos entre la población más vulnerable (enfermos cardíacos, niños y ancianos, etc.). En cualquier caso, la contaminación es un factor que disminuye la calidad de vida de los seres humanos. Desafortunadamente, el impacto en los ecosistemas que tiene la mezcla de contaminantes no sólo es local, como en el caso del esmog foto-

químico ciudadano^[3]; también puede ser regional, como los eventos de deposiciones ácidas^[2,32], o global, como el fenómeno de destrucción de la capa de ozono y el cambio climático mundial^[31].

La sociedad actual no puede regresar a un momento preindustrial para resolver los problemas que ocasiona la contaminación atmosférica, por lo tanto, es fundamental realizar estudios que determinen programas de control de emisiones; estos programas deben implementar medidas para disminuir la concentración de cada sustancia nociva en la atmósfera hasta que se ubique por debajo de las normas sanitarias máximas admisibles o normas de la calidad del aire.

Una forma de abordar el estudio de la concentración de los contaminantes en la atmósfera, y posteriormente su control, consiste en la aplicación de modelos matemáticos de dispersión de contaminantes^[19,25,39]. La ventaja que proporciona esta herramienta consiste en simular por computadora la concentración de los diversos contaminantes primarios y secundarios en una región, y con esto identificar los lugares donde las emisiones tienen un mayor impacto, es decir, permite identificar las fuentes que provocan que una determinada zona con especial sensibilidad (zonas habitacionales, bosques, etc), rebase las concentraciones máximas admisibles. Con esta información es posible planificar la instalación de nuevas zonas industriales^[19,20], montar dispositivos de seguridad en regiones de alto riesgo para evitar accidentes o descargas clandestinas y diseñar estrategias de control de emisiones para las industrias ya asentadas^[15,27,28,48].

El presente trabajo aporta un modelo matemático, basado en un modelo de dispersión y su adjunto, que permite generar algunas estrategias de control de emisiones puntuales. Estas estrategias consisten en el rediseño o acotación de las tasas de emisión de las fuentes industriales, con el fin de que se cumplan las normas de la calidad del aire. Ya que las normas sanitarias representan promedios temporales, las estrategias de control que se sugieren buscan reducir la concentración promedio de los contaminantes, en una determinada región y sobre un intervalo de tiempo, hasta niveles aceptables.

Estas estrategias de control, que permiten el cálculo explícito de la tasa de emisión para cada fuente puntual a través de la función adjunta, constituyen la aportación original en esta tesis, y se presentan en el Capítulo 4. En el mismo capítulo se consideran algunos ejemplos de aplicación de estos controles cuando el pronóstico del modelo de dispersión implica la violación de las normas sanitarias. El Capítulo 3 presenta el concepto fundamental

de adjunción, el cual es la base en la construcción de todos los controles sugeridos. En el Capítulo 5 se presenta un esquema de solución numérica para los modelos de dispersión y su adjunto, y finalmente, en el Capítulo 6 se presentan algunas generalizaciones.

Al estudiar un problema inverso, como es el del control de emisiones industriales, es muy importante el análisis y solución del problema directo^[12] (dispersión de contaminantes); por lo tanto, este primer capítulo está dedicado a presentar los conceptos básicos necesarios para establecer, en el Capítulo 2, un modelo confiable de dispersión.

1.1. Contaminación atmosférica

En forma general, un *contaminante atmosférico* es una sustancia que por fuentes naturales o antropogénicas se emite a la atmósfera, en cantidades tales que a corto, mediano, o largo plazo, ocasiona efectos negativos en los seres vivos, en los ecosistemas, y en los materiales.

Los eventos naturales, como erupciones volcánicas, incendios forestales y procesos de fermentación anaeróbica, pueden producir grandes cantidades de contaminantes^[9] (bióxido de azufre (SO_2), bióxido de carbono (CO_2), óxidos de nitrógeno (NO_x), metano (CH_4), ácido clorhídrico (HCl), amoníaco (NH_3), ácido sulfhídrico (H_2S), particulado sólido, etc.); sin embargo, dichos eventos son esporádicos. Son las actividades antropogénicas, como la agricultura y ganadería, generación de electricidad, transporte, minería, metalurgia, industria química y electrónica, y tratamiento de residuos, las principales generadoras de contaminantes^[45] (SO_2 , monóxido de carbono (CO), CO_2 , NO_x , CH_4 , HCl , NH_3 , ozono (O_3), ácido sulfúrico (H_2SO_4), ácido nítrico (HNO_3), metales pesados (Pb , Cd , Zn), hidrocarburos, etc.), tanto por la diversidad de sustancias como por las cantidades emitidas y su frecuencia de emisión.

Si se considera el fenómeno de la contaminación atmosférica en forma regional y a mediano plazo, entonces del volumen total de contaminantes emitidos se concluye que son cinco de ellos los más importantes, por aportar el 95 % de la contaminación^[4, 34]. Estos contaminantes son: el monóxido de carbono (CO), el bióxido de azufre (SO_2), los óxidos de nitrógeno (NO_x), los hidrocarburos y el material particulado. De éstas, las tres primeras son sustancias químicas que poseen una composición definida; los hidrocarburos son una familia de sustancias; y finalmente, bajo el nombre de material particu-

lado figuran los aerosoles líquidos o sólidos que se encuentran en suspensión en el aire y que se presentan con dimensiones que van de 0.001 a 10000 micras.

El monóxido de carbono, los óxidos de nitrógeno y los hidrocarburos, tienen su origen principalmente por la combustión de gasolinas en automotores, mientras que el bióxido de azufre y el material particulado se emiten por fuentes industriales, como termoeléctricas, incineradores y cementeras.

La concentración de estos cinco contaminantes, junto con la del ozono (cuya formación y acumulación^[3, 16] depende de la presencia de los óxidos de nitrógeno, hidrocarburos, y radiación solar con una longitud de onda de 430 nm), es lo que se utiliza como índice de la calidad del aire^[4]. Con el fin de comparar estas concentraciones y poder definir el grado de la contaminación atmosférica en un determinado momento, se establece para cada sustancia una concentración máxima admisible o norma sanitaria, la cual es un promedio que está en función de la toxicidad particular de la sustancia y del tiempo de exposición a ésta. El valor numérico de cada norma sanitaria cambia según el intervalo de tiempo considerado, y juntas determinan los niveles de polución máxima a los cuales pueden estar sometidas las personas, y de ninguna forma es posible considerarlas como indicadores de una atmósfera limpia. La siguiente tabla muestra algunas de las normas sanitarias^[4, 45] para los seis contaminantes principales.

Tabla 1.1

Compuesto	Norma ($\frac{\mu g}{m^3}$)	Intervalo de tiempo
<i>CO</i>	10000	media de 8 horas
	40000	media de 1 hora
<i>NO_x</i>	100	media en 1 año
	200	media de 1 hora
<i>Hidrocarburos</i>	160	media de 3 horas
<i>SO₂</i>	80	media en 1 año
	365	media diaria
<i>particulado</i>	75	media en un año
	260	media diaria
<i>ozono</i>	240	media de 1 hora

Los efectos nocivos que produce cada contaminante en el medio ambiente y en particular en los seres humanos, depende de diversos factores, como son:

toxicidad de la sustancia, cantidad y frecuencia de la materia introducida al medio, diversidad de compuestos, condiciones del medio (estabilidad atmosférica, humedad, grado de acidez, capacidad de oxidación) y reactividad. Este último factor es de gran importancia, ya que algunas sustancias introducidas a la atmósfera tienden, por diversas reacciones químicas, a generar otras sustancias (contaminantes secundarios) de mayor toxicidad^[17], o a consumir sustancias importantes para un ecosistema. Ejemplos típicos de contaminantes secundarios son el ozono y los ácidos sulfúrico y nítrico; el primero se forma^[16] cuando la radiación solar descompone el dióxido de nitrógeno en presencia de hidrocarburos reactivos, como los radicales peróxido; las dos últimas se forman^[16] cuando el bióxido de azufre y el bióxido de nitrógeno reaccionan con los radicales *OH* y el agua. Estas sustancias ácidas pueden tener un impacto lejos de la fuente de origen^[2,32], ya que las reacciones que las forman son lentas. De esta forma, emisiones que tienen lugar en Alemania se perciben como lluvia ácida en Suecia; es decir, el impacto es regional. En el caso del ozono las reacciones involucradas son rápidas y su impacto es local; esto lo convierte en un elemento del esmog fotoquímico de ciudades como Los Ángeles (EU) y la Ciudad de México^[3].

La reactividad es un factor que hace que los eventos de contaminación sean fenómenos muy complejos de estudiar y controlar con modelos matemáticos, ya que las reacciones involucradas generan ecuaciones que por lo general son no lineales^[15,25]. Como una aproximación inicial al problema de control, en este trabajo se considera reactividad de primer orden o lineal.

Por otra parte, es importante destacar que el impacto que tienen los diversos contaminantes en la salud de los seres humanos es aún un tema parcialmente conocido, ya que se entienden los efectos de sustancias en grandes cantidades algunas horas, pero en general se desconoce el impacto que concentraciones medias o bajas producen a lo largo de años y décadas. Por ejemplo, los experimentos que se han realizado con animales demuestran que concentraciones de 2 ppm de ozono durante 3 horas son letales^[4]; por otra parte, las concentraciones que se tienen durante los episodios de esmog fotoquímico en las ciudades son de alrededor de 0.1 ppm durante periodos de 4 a 8 horas en un día, lo cual provoca irritaciones en los ojos y ataques de asma, sin embargo, se ignoran las consecuencias de vivir expuesto a este contaminante por años. Otro ejemplo de este tipo lo constutuyen los hidrocarburos polinucleares, como el benzopireno; estas sustancias provienen de la combustión del carbón, el combustóleo y las gasolinas, y se identifican como potentes cancerígenos en altas concentraciones; sin embargo, no se conoce

su impacto sobre las personas cuando están presentes en concentraciones de algunos nanogramos por metro cúbico, que es la concentración típica en las grandes ciudades.

Un factor que tiende a complicar el impacto de los contaminantes en los seres vivos, es el hecho de que en el medio ambiente coexisten cientos de sustancias nocivas a la vez, las cuales pueden provocar un mayor daño en su acción conjunta, que la suma de los impactos de cada sustancia por separado (fenómeno conocido como *sinergia*). Por ejemplo, el episodio de contaminación atmosférica en diciembre de 1952 en Londres, al cual se le atribuyen 4000 muertes^[45], fue el resultado de la acción sinérgica del bióxido de azufre con el particulado sólido, ambas sustancias formadas por la combustión del carbón en hogares y factorías.

1.2. Dispersión de los contaminantes en la atmósfera

Todo episodio de contaminación atmosférica está constituido por: *la fuente de producción* del contaminante (caracterizada por su tasa de emisión), *el medio de transporte y de transformación física y química* (atmósfera) y *el medio receptor*. Es en el medio de transporte y de transformación donde la mezcla de los contaminantes primarios y secundarios se dispersan generando impactos locales (esmog fotoquímico), regionales (lluvia ácida) o incluso planetarios (destrucción de la capa de ozono).

La dispersión en la atmósfera de los efluentes que proceden de respiraderos y chimeneas (fuentes puntuales) es un fenómeno complejo, ya que depende de varios factores correlacionados, como son: la naturaleza física y química de las sustancias emitidas, las características meteorológicas de la región, la ubicación de las chimeneas con respecto a la dirección del viento, la tasa de emisión de cada fuente puntual y el tipo de terreno en la dirección del viento.

Por regla general, los vertidos a la atmósfera tienen lugar en la *capa de mezcla*; ésta corresponde a la capa de la atmósfera directamente en contacto con la superficie terrestre y es donde, con mucha frecuencia, tienen lugar turbulencias a causa de la interacción del viento con la rugosidad superficial. Estas turbulencias tienden a dispersar a los contaminantes y de esta forma los gases y las partículas pequeñas, de tamaño inferior a $1 \mu\text{m}$ (aerosoles), pueden alcanzar mayores altitudes e introducirse en la troposfera libre. Diversos modelos matemáticos usan la difusión turbulenta como el principal elemento de la dispersión de contaminantes; sin embargo, conforme se incrementa la

altura el transporte advectivo se hace más importante. Por lo tanto, al considerar un contaminante en la troposfera, se debe tomar en cuenta que éste se dispersa fundamentalmente por: *transporte por advección* (desplazamiento horizontal de la masa contaminante incorporada al movimiento dominante de la masa de aire), *transporte por convección* (desplazamiento vertical de la masa contaminante incorporada al movimiento dominante de la masa de aire), *difusión molecular* (desplazamiento aleatorio de las moléculas por su agitación térmica) y *difusión turbulenta* (desplazamiento aleatorio de la masa contaminante debido a movimientos al azar de la masa de aire).

Dos factores que limitan la dispersión de los contaminantes en la atmósfera son la lluvia y, en el caso de partículas sólidas o líquidas, su tamaño. Por lo general, si el particulado es de origen natural entonces tarda en depositarse en la superficie terrestre un día, sin embargo, si es de origen antropogénico entonces es de menor tamaño (décimas de μm), y tarda en depositarse más de diez días.

Para construir modelos de dispersión, es importante notar que la concentración en espacio y tiempo de cada especie contaminante emitida a la atmósfera es una variable aleatoria, ya que la dispersión de estas sustancias depende de las fluctuaciones aleatorias de variables meteorológicas y de las fuentes de emisión.

Existen dos aproximaciones matemáticas básicas para describir la dispersión de contaminantes; éstas son la aproximación *Euleriana* y la aproximación *Lagrangiana*. Ambas aproximaciones definen modelos probabilísticos, ya que describen las concentraciones como función de variables aleatorias. De estos modelos probabilísticos es posible obtener modelos determinísticos al hacer simplificaciones; es decir, tomar promedios en las variables aleatorias, considerar que las variables aleatorias cumplen ciertas funciones de densidad de probabilidad, aproximar términos estocásticos en función de valores promedio, idealizar condiciones atmosféricas, de las fuentes de emisión y de la reactividad de las sustancias. Es importante destacar que los modelos deterministas derivados de las aproximaciones Euleriana y Lagrangiana simulan concentraciones puntuales promedio de cada especie contaminante.

Aproximación Euleriana

Si se considera un diferencial de volumen *fijo* y se hace un balance de masa para cada especie contaminante en éste, en función de los flujos de masa transportados por el viento, los flujos por difusión molecular, las emisiones y la transformación por reactividad (generación o destrucción), se obtienen

las siguientes ecuaciones^[34] para $\alpha = 1 \dots N$,

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (UC_\alpha) = \nabla \cdot (D\nabla C_\alpha) + R_\alpha(C_1, \dots, C_N, T) + S_\alpha(\mathbf{r}, t). \quad (1.1)$$

Donde C_α es la concentración de la especie α , U es la velocidad del viento, D es el coeficiente de difusión molecular, R_α es la rapidez de transformación química (la cual depende de la temperatura T) y S_α es la fuente de emisión de la especie α .

La velocidad U es la suma de una componente determinística \bar{U} y una componente estocástica U' (responsable de la difusión turbulenta); por lo tanto la solución C_α de (1.1) es una variable aleatoria. Ya que no es posible medir U' , entonces en la práctica no es posible resolver (1.1) para encontrar C_α . Por esta razón, el siguiente paso en el modelo Euleriano es simplificar para alcanzar un modelo que involucre sólo promedios (modelo determinista).

Si se considera la ecuación de continuidad $\nabla \cdot U = 0$, se promedia en la ecuación (1.1), se desprecia la difusión molecular contra la turbulenta y se cierra el problema de la turbulencia de acuerdo con la K-Teoría^[34]:

$$\langle U' C'_\alpha \rangle = -K \nabla \langle C_\alpha \rangle,$$

entonces se llega al siguiente modelo determinista, para $\alpha = 1 \dots N$

$$\frac{\partial \langle C_\alpha \rangle}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla \langle C_\alpha \rangle = \nabla \cdot K \nabla \langle C_\alpha \rangle + R_\alpha(\langle C_1 \rangle, \dots, \langle C_N \rangle, T) + S_\alpha(\mathbf{r}, t). \quad (1.2)$$

Donde K es el tensor de difusividad turbulenta y $\langle C_\alpha \rangle$ la concentración promedio de la especie α .

Algunas de las ventajas que presenta el modelo (1.2) son:

- (i) es posible aplicarlo con variabilidad de condiciones atmosféricas,
- (ii) las fuentes de emisión pueden ser de área o puntuales, y no-estacionarias,
- (iii) incluye reactividad de las especies contaminantes, y
- (iv) permite conocer la distribución de contaminantes en toda la región donde se aplica, y por lo tanto, realizar control sobre las tasas de emisión.

Las desventajas en este modelo consisten en lo siguiente:

- (i) se requiere fijar condiciones de frontera consistentes con el fenómeno, lo cual es un factor que influye en los pronósticos de largo plazo.

- (ii) la solución numérica requiere grandes recursos de cómputo y tiempo de ejecución, y
- (iii) es difícil dar una correcta aproximación numérica al término advectivo

$$\bar{U} \cdot \nabla \langle C_{\alpha} \rangle,$$

el cual está presente en cada una de las ecuaciones del sistema (1.2).

Aproximación Lagrangiana

Si se considera un diferencial de volumen que se *mueve* con el fluido y se hace en éste un balance de masa, entonces se obtiene el siguiente modelo para la concentración media de una especie contaminante^[34]:

$$\begin{aligned} \langle C(\mathbf{r}, t) \rangle = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, t_0) \langle C(\mathbf{r}_0, t_0) \rangle d\mathbf{r}_0 + \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{t_0}^t Q(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}', t') S(\mathbf{r}', t') dt' d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Donde Q es la densidad de probabilidad de transición de masa. La primera integral representa las partículas presentes al tiempo t_0 en el diferencial de volumen, y la segunda cuenta las partículas adicionadas por la fuente S en el trayecto de t_0 a t .

Este modelo probabilístico puede ser fácilmente resuelto (sólo hay que integrar), sin embargo, en la práctica Q no se conoce (salvo para casos de trayectorias simples). Otra desventaja de esta formulación es que no incluye reactividad.

Para alcanzar un modelo determinista basado en promedios^[34] se considera que la velocidad es independiente de la posición y sólo depende del tiempo; además, su densidad de probabilidad se supone normal o Gaussiana:

$$p(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_u} \exp \left\{ -\frac{(u - \bar{u})^2}{2\sigma_u^2} \right\},$$

con correlación

$$\langle (u(t) - \bar{u})(u(\tau) - \bar{u}) \rangle = \sigma_u^2 \exp(-b|t - \tau|).$$

Si la fuente es puntual con intensidad constante q , entonces la concentración promedio de estado estacionario que se obtiene integrando (1.3) con las condiciones descritas es

$$\langle C(x, y, z) \rangle = \frac{q}{2\pi\bar{u}\sigma_y\sigma_x} \exp \left\{ -\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2} \right\}. \quad (1.4)$$

Esto significa que la distribución de masa contaminante en un corte transversal a la dirección del viento \bar{u} , satisface una distribución normal o Gaussiana. Esta conclusión ha sido parcialmente verificada por experimentación de campo para condiciones meteorológicas de turbulencia homogénea en tiempos mayores de una hora.

La ecuación (1.4) recibe el nombre de *pluma de Slender* y forma parte de la familia de los modelos de dispersión Gaussiana.

Las ventajas de los modelos de dispersión Gaussiana son:

- (i) son modelos simples que hacen predicciones en tiempos de cómputo cortos, y
- (ii) se aplica para N fuentes con superposición.

Las desventajas de estos modelos consisten en lo siguiente:

- (i) es difícil incorporar la variabilidad de los parámetros meteorológicos, por lo cual, se aplican como modelos que aproximan el estado estacionario con condiciones de turbulencia homogénea,
- (ii) no se aplican en vientos débiles o mal definidos, y
- (iii) no se aplican a sustancias reactivas o contaminantes secundarios.

Los primeros esfuerzos para modelar la dispersión de contaminantes atmosféricos fueron aplicados a sustancias poco reactivas en tiempos cortos, como el dióxido de azufre y el particulado (hollín, metales pesados). Sustancias que ya habían provado su peligrosidad en varias ciudades. Por esta razón, fueron los modelos de dispersión Gaussiana los primeros en aplicarse en la década de los años setenta, resultando útiles para algunas aplicaciones prácticas.

Es importante destacar que se puede llegar a los modelos de dispersión Gaussiana a través de la formulación Euleriana. Para esto, basta reducir (1.2) a su estado estacionario para una velocidad constante que domina la difusión en esa dirección, sin considerar reactividad y tomando sólo una fuente puntual (ecuación de Fick^[45]), la solución que se obtiene entonces es (1.4).

Aun cuando los modelos de dispersión Gaussiana tienen ventajas, hoy en día se usan poco debido a que se requiere incorporar reactividad y variabilidad atmosférica. Por lo anterior, y debido al avance en los sistemas de cómputo, se usan generalmente para modelar la dispersión de contaminantes los modelos Eulerianos tridimensionales.

1.3. Control de emisiones

Los programas para el control de la contaminación atmosférica tienen por objetivo central establecer un conjunto de acciones cuya ejecución permita que se cumplan una serie de normas de la calidad del aire; es decir, se busca que la concentración de cada contaminante primario y secundario en la atmósfera no exceda la norma sanitaria respectiva, o al menos, que los eventos donde se violan las normas de calidad del aire se presenten en un número reducido de horas o días al año.

Si se considera el tiempo de aplicación estos programas se pueden clasificar en dos categorías^[10]: *control a largo plazo* y *control a corto plazo*. Estos programas de control son complementarios y difieren por sus objetivos específicos y por las estrategias que aplican para alcanzar sus metas.

El control a largo plazo se implementa en periodos de varios meses o años y consiste en la aplicación de estrategias que reducen, en estos periodos, la masa total de contaminantes emitidos. Algunas de las acciones típicas que se implementan son:

- a) sustitución parcial o definitiva de algunos combustibles,
- b) introducción de nuevas tecnologías de producción y de limpieza (filtros o catalizadores),
- c) cierre o reubicación de plantas industriales en una región,
- d) programas para la disminución del uso de automotores, etc.

Es importante destacar que estas estrategias tienen la meta común de reducir el número de días al año que se violan las normas de la calidad del aire, es decir, su aplicación no necesariamente evita que en un día particular se alcancen concentraciones peligrosas de un contaminante. Esta flexibilidad está implícita en la forma en que se diseña el conjunto de acciones por implantar a largo plazo, ya que para éstas se considera no sólo las normas de calidad del aire sino también se usa el criterio de costo-beneficio; es decir, el conjunto de políticas a largo plazo se diseñan al minimizar

$$C = C_e + C_s,$$

donde C_e es el costo de implementar las acciones de control y C_s es el costo por los daños en la salud de la población y al ecosistema. Además, este proceso de minimización está sujeto a que el número de días al año en que se violan las normas de calidad del aire esté acotado, es decir,

$$N(C_\alpha > C_\alpha^0) \leq N_{\max}.$$

La variable C_e es creciente al disminuir los niveles de contaminación mientras que la variable C_s es decreciente; por lo tanto, la suma C presenta un mínimo el cual se toma como el conjunto óptimo de acciones por aplicar.

Una condición implícita en las políticas que conforman la última desigualdad (espacio de factibilidad) es que incorporan el conocimiento cuantitativo de la reducción necesaria, en las tasas de emisión, para que la concentración de los diferentes contaminantes esté por debajo de las normas sanitarias (salvo N_{\max} días al año). Este conocimiento cuantitativo se representa con el rediseño o acotación de las tasas de emisión (Capítulo 4), las cuales se deben reconstruir de acuerdo al pronóstico que realiza un modelo de dispersión.

Por otra parte, el control a corto plazo se aplica en periodos de varias horas o días durante eventos de estabilidad atmosférica que favorecen la acumulación de los contaminantes. Las acciones que caracterizan a este tipo de control son las que producen una disminución inmediata de las emisiones contaminantes e incluyen el paro total de algunas actividades industriales. La meta específica en el control a corto plazo es mantener, durante el periodo de estabilidad atmosférica, la concentración de los diferentes contaminantes por debajo de las normas sanitarias.

Un ejemplo de estrategia de control a corto plazo es la sustitución de combustibles en plantas termoelectricas; este procedimiento implica la sustitución, por algunas horas de operación, del carbón mineral o combustóleo por algún combustible (gas natural) que, aun cuando sea mas caro, libere menos contaminantes (SO_2).

Otra estrategia típica en el control a corto plazo consiste en el diseño de las tasas de emisión con las que deben trabajar las diferentes fuentes industriales durante los periodos donde hay un pronóstico de estabilidad atmosférica, o al menos, definir límites que no deben exceder las tasas de emisión en cada planta industrial (Capítulo 4). Estas estrategias pueden ser muy restrictivas para algunas fuentes industriales, sin embargo, éstas sólo se deben aplicar hasta que las condiciones atmosféricas favorezcan la dispersión de los contaminantes.

Queda establecido entonces que, tanto en las políticas de control a largo plazo como en las de control de corto plazo, es de gran importancia tener un conocimiento cuantitativo de la reducción necesaria en las tasas de emisión para evitar alcanzar niveles donde los contaminantes dañen a la población. Actualmente este conocimiento preventivo no se ha incorporado en forma adecuada a los programas para abatir la contaminación atmosférica, ya que algunos de éstos (Programa de Contingencias Ambientales de la Cd. de

México^[29] y [33]) sólo toman acciones hasta que la concentración de los diferentes contaminantes han alcanzado niveles peligrosos.

1.3.1. Un modelo simple de control de emisiones

Si se considera una región tridimensional R de frontera abierta, con volumen V , que contenga todas las fuentes de emisión de un contaminante primario A , entonces, aplicando un balance de masa es posible escribir el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{Q}{V} - \left(\sigma_1 + \frac{r}{V} \right) \alpha, \quad (1.5)$$

$$\alpha(0) = \alpha_0, \quad (1.6)$$

$$\frac{d\beta}{dt} = \sigma_1 \alpha - \left(\sigma_2 + \frac{r}{V} \right) \beta, \quad (1.7)$$

$$\beta(0) = \beta_0. \quad (1.8)$$

α y β representan respectivamente la concentración de las especies contaminantes primaria (A) y secundaria (B), para las cuales se supone un mecanismo de transformación de primer orden con tasas σ_1 y σ_2 ,



Q representa la tasa total de emisión del contaminante primario, y ya que todas las fuentes contaminantes están contenidas en R , entonces no hay una contribución externa para la concentración de las especies primaria y secundaria. Sin embargo, el viento U transporta la mezcla de las especies contaminantes fuera de R a una tasa

$$r = \int_{S^+} U \cdot n \, dS.$$

Donde S^+ representa la parte de la frontera de R donde el viento sale de la región, la cual está caracterizada por la ecuación: $U \cdot n > 0$ (n es el vector normal exterior a la frontera de R); siendo S^- su complemento o la parte de la frontera donde el viento ingresa a la región.

Finalmente, α_0 y β_0 representan las concentraciones iniciales de las especies contaminantes en R .

En este modelo se ha supuesto que los contaminantes se dispersan en la región rápidamente y de forma homogénea, lo cual es una primera aproximación de un fenómeno más complejo; sin embargo, con el fin de comenzar a obtener información esta hipótesis se aplica en algunos modelos de cajas de la US-EPA^[35,47] (UAM, EKMA), donde cada caja tiene dimensiones de algunas decenas de kilómetros.

Si se considera que U y Q son invariantes en el tiempo, entonces, para la ecuación (1.5) se tiene una solución de equilibrio asintótica y globalmente estable

$$\alpha_e = \frac{Q}{r + \sigma_1 V}.$$

Lo cual se concluye de la solución del problema de valores iniciales (1.5)-(1.6)

$$\alpha = \alpha_e + (\alpha_0 - \alpha_e) \cdot \exp\left(-\left(\sigma_1 + \frac{r}{V}\right)t\right).$$

Para la ecuación (1.7) también se tiene un estado de equilibrio asintótico que es globalmente estable

$$\beta_e = \frac{\sigma_1 V}{r + \sigma_2 V} \cdot \alpha_e.$$

Esto se concluye de la solución del problema de valores iniciales (1.7)-(1.8),

$$\begin{aligned} \beta &= \beta_e + (\beta_0 - \beta_e) \cdot \exp\left(-\left(\sigma_2 + \frac{r}{V}\right)t\right) + \\ &+ \frac{\sigma_1}{\sigma_2 - \sigma_1} (\alpha_0 - \alpha_e) \left[\exp\left(-\left(\sigma_1 + \frac{r}{V}\right)t\right) - \exp\left(-\left(\sigma_2 + \frac{r}{V}\right)t\right) \right] \quad (\sigma_1 \neq \sigma_2). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta &= \beta_e + (\beta_0 - \beta_e) \cdot \exp\left(-\left(\sigma_1 + \frac{r}{V}\right)t\right) + \\ &+ \sigma_1 \cdot (\alpha_0 - \alpha_e) \cdot t \cdot \exp\left(-\left(\sigma_1 + \frac{r}{V}\right)t\right) \quad (\sigma_1 = \sigma_2). \end{aligned}$$

De aquí se concluye que la concentración de los contaminantes primario y secundario se estabiliza a largo plazo; y por lo tanto, para lograr que a largo

plazo se cumplan las normas sanitarias sólo se necesita acotar Q de tal forma que se cumplan las desigualdades

$$\alpha_e < N_A \quad \text{y} \quad \beta_e < N_B.$$

Donde N_A y N_B son las normas sanitarias para los contaminantes primario y secundario respectivamente.

El control a largo plazo se logra al considerar

$$Q < \min \left\{ N_A \cdot (r + \sigma_1 V) , N_B \cdot \frac{(r + \sigma_1 V)(r + \sigma_2 V)}{\sigma_1 V} \right\}.$$

Es importante notar que $N_A \cdot (r + \sigma_1 V)$ y $N_B \cdot \frac{(r + \sigma_1 V)(r + \sigma_2 V)}{\sigma_1 V}$ son cotas suficientes para lograr el control de los contaminantes primario y secundario respectivamente, y ya que son valores diferentes, entonces se puede concluir que el control a largo plazo de un contaminante primario no implica el de un contaminante secundario necesariamente y viceversa, por esto es necesario tomar el mínimo de las cotas. Esta misma conclusión se obtiene más adelante para el control de corto plazo.

Otro aspecto por considerar es que lograr el control a largo plazo no implica el control a corto plazo; esto es fácil de concluir si se toma $\alpha_0 > N_A > \alpha_e$ y se observa que la solución de (1.5)-(1.6), aun cuando es decreciente, no satisface la norma de calidad del aire en un intervalo de tiempo finito $(0, \tau)$, donde τ está definido por

$$\tau = \frac{V}{r + \sigma_1 V} \cdot \ln \left(\frac{\alpha_0 - \alpha_e}{N_A - \alpha_e} \right).$$

Para establecer cotas en la tasa de emisión Q , y obtener el control a corto plazo de un contaminante primario, se considera la concentración promedio de este contaminante en un intervalo finito,

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{T} \int_0^T \alpha dt = \alpha_e \left(1 - \frac{\theta_1}{T} \right) + \alpha_0 \cdot \frac{\theta_1}{T},$$

donde θ_i ($i = 1, 2$) se define por:

$$\theta_i = \frac{1 - \exp \left(- \left(\sigma_i + \frac{r}{V} \right) T \right)}{\sigma_i + \frac{r}{V}}.$$

Si se observa que

$$\forall T > 0, \quad 0 < \frac{\theta_1}{T} < 1 \quad \text{y} \quad 0 < 1 - \frac{\theta_1}{T} < 1,$$

se concluye que el control a corto plazo no siempre será posible y quedará determinado por la distribución inicial del contaminante; es decir,

- i) si $\frac{\theta_1}{T} \cdot \alpha_0 > N_A$, entonces para cualquier $Q \geq 0$ se tiene la violación de la norma sanitaria, es decir, aun cuando la actividad industrial se detenga ($Q = 0$) se tendrá que $\bar{\alpha} > N_A$,
- ii) si $\frac{\theta_1}{T} \cdot \alpha_0 = N_A$, entonces la única posibilidad para el control es parar la actividad industrial ($Q = 0$) en el intervalo de tiempo $[0, T]$,
- iii) finalmente, si $\frac{\theta_1}{T} \cdot \alpha_0 < N_A$, entonces, para el control a corto plazo del contaminante primario se debe acotar la tasa de emisión de la siguiente forma:

$$Q < \frac{N_A - \frac{\theta_1}{T} \cdot \alpha_0}{1 - \frac{\theta_1}{T}} \cdot (r + \sigma_1 V).$$

Este análisis nos permite concluir que la distribución inicial de los contaminantes definen un valor límite o umbral que es fundamental en el control a corto plazo, ya que éste nos dice si es posible que siga trabajando la industria, a que ritmo, o si debe parar en un intervalo de tiempo finito $[0, T]$. Sin embargo, en el control a largo plazo la distribución inicial de los contaminantes no es decisiva, siendo más importante el comportamiento asintótico.

Al considerar el control a corto plazo del contaminante secundario se obtiene la misma conclusión, ya que para $\sigma_1 \neq \sigma_2$ se tiene que

$$\bar{\beta} = \frac{1}{T} \int_0^T \beta dt = \alpha_e \left[\left(1 - \frac{\theta_2}{T} \right) \frac{\sigma_1 V}{r + \sigma_2 V} - \frac{\sigma_1 (\theta_1 - \theta_2)}{T (\sigma_2 - \sigma_1)} \right] + \frac{\theta_2}{T} \beta_0 + \frac{\sigma_1 (\theta_1 - \theta_2)}{T (\sigma_2 - \sigma_1)} \alpha_0.$$

Si se observa que

$$\frac{(\theta_1 - \theta_2)}{T \cdot (\sigma_2 - \sigma_1)} > 0, \quad \forall T > 0,$$

entonces los criterios de control son:

- i) si $\frac{\theta_2}{T} \cdot \beta_0 + \frac{\sigma_1 (\theta_1 - \theta_2)}{T (\sigma_2 - \sigma_1)} \cdot \alpha_0 > N_B$, entonces para cualquier $Q \geq 0$ se tiene la violación de la norma sanitaria, es decir, aun cuando la actividad industrial se detenga ($Q = 0$) se tendrá que $\bar{\beta} > N_B$,

ii) si $\frac{\theta_2}{T} \cdot \beta_0 + \frac{\sigma_1 \cdot (\theta_1 - \theta_2)}{T \cdot (\sigma_2 - \sigma_1)} \cdot \alpha_0 = N_B$, entonces la única posibilidad para el control es parar la actividad industrial ($Q = 0$) en el intervalo de tiempo $[0, T]$,

iii) finalmente, si $\frac{\theta_2}{T} \cdot \beta_0 + \frac{\sigma_1 \cdot (\theta_1 - \theta_2)}{T \cdot (\sigma_2 - \sigma_1)} \cdot \alpha_0 < N_B$, entonces, para el control a corto plazo del contaminante secundario se debe acotar la tasa de emisión de la siguiente forma:

$$Q < \frac{N_B - \frac{\theta_2}{T} \cdot \beta_0 - \frac{\sigma_1 \cdot (\theta_1 - \theta_2)}{T \cdot (\sigma_2 - \sigma_1)} \cdot \alpha_0}{\left(1 - \frac{\theta_2}{T}\right) \frac{\sigma_1 V}{r + \sigma_2 V} - \frac{\sigma_1 \cdot (\theta_1 - \theta_2)}{T \cdot (\sigma_2 - \sigma_1)}} \cdot (r + \sigma_1 V).$$

En el caso $\sigma_1 = \sigma_2$ se determina que

$$\bar{\beta} = \frac{1}{T} \int_0^T \beta dt = \alpha_e \cdot \frac{\sigma_1 V}{r + \sigma_1 V} \cdot \left[1 - \frac{\theta_1}{T} - \Theta_1\right] + \frac{\theta_1}{T} \cdot \beta_0 + \frac{\sigma_1 V}{r + \sigma_1 V} \cdot \Theta_1 \cdot \alpha_0,$$

donde el nuevo parámetro Θ_1 satisface que

$$\Theta_1 = \frac{\theta_1}{T} - \exp\left(-\left(\sigma_1 + \frac{r}{V}\right)T\right) > 0, \quad \forall T > 0.$$

De aquí se obtienen los siguientes criterios de control:

i) si $\frac{\theta_1}{T} \cdot \beta_0 + \frac{\sigma_1 V}{r + \sigma_1 V} \cdot \Theta_1 \cdot \alpha_0 > N_B$, entonces para cualquier $Q \geq 0$ se tiene la violación de la norma sanitaria, es decir, aun cuando la actividad industrial se detenga ($Q = 0$) se tendrá que $\bar{\beta} > N_B$,

ii) si $\frac{\theta_1}{T} \cdot \beta_0 + \frac{\sigma_1 V}{r + \sigma_1 V} \cdot \Theta_1 \cdot \alpha_0 = N_B$, entonces la única posibilidad para el control es parar la actividad industrial ($Q = 0$) en el intervalo de tiempo $[0, T]$,

iii) finalmente, si $\frac{\theta_1}{T} \cdot \beta_0 + \frac{\sigma_1 V}{r + \sigma_1 V} \cdot \Theta_1 \cdot \alpha_0 < N_B$, entonces, para el control a corto plazo del contaminante secundario se debe acotar la tasa de emisión de la siguiente forma:

$$Q < \frac{N_B - \frac{\theta_1}{T} \cdot \beta_0 - \frac{\sigma_1 V}{r + \sigma_1 V} \cdot \Theta_1 \cdot \alpha_0}{\sigma_1 V \cdot \left(1 - \frac{\theta_1}{T} - \Theta_1\right)} \cdot (r + \sigma_1 V)^2.$$

Por último, se observa que hay continuidad entre las cotas sobre Q a corto y largo plazo deducidas para este modelo; es decir, si aplicamos en las cotas de corto plazo que

$$T \lim_{T \rightarrow +\infty} \frac{\theta_i}{T} = 0 \quad (i = 1, 2) \quad \text{y} \quad T \lim_{T \rightarrow +\infty} \Theta_1 = 0,$$

entonces se obtienen las cotas de largo plazo. Esto nos sugiere definir estrategias de largo plazo con el paso al límite cuando $T \rightarrow +\infty$ sobre las estrategias a corto plazo.

Capítulo 2

Modelo de dispersión

Para establecer estrategias efectivas en el control de la concentración de los contaminantes atmosféricos es necesario contar con un adecuado modelo de dispersión. Tal modelo debe estar bien formulado en el sentido matemático, es decir, la solución debe ser única y tiene que depender continuamente de las condiciones iniciales, de las condiciones de frontera y del forzamiento. Aun para modelos simplificados en una región limitada no es trivial lograr que éstos estén bien formulados, ya que en general, el flujo de los contaminantes a través de la frontera abierta no es un parámetro bien conocido, y por lo tanto, esto puede generar una perturbación que se propague dentro del dominio por advección y difusión que finalmente destruya la solución del modelo. Por lo tanto, es de gran importancia colocar condiciones de frontera que determinen un modelo bien formulado en el sentido matemático y que sean consistentes con el fenómeno físico.

En este capítulo se define un modelo Euleriano de dispersión de contaminantes y se muestra que, con las condiciones de frontera impuestas, la solución débil es única y estable respecto de perturbaciones en las condiciones iniciales (distribución inicial de los contaminantes) y del forzamiento (tasas de emisión).

2.1. Definición del modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos

Una sustancia contaminante en la atmósfera se encuentra sujeta a diversos procesos físicos y químicos que influyen en su propagación; tres de éstos son: transporte por advección, difusión turbulenta y transformación por reac-

ciones químicas. En lo que sigue se formula un modelo lineal que toma en cuenta estos tres fenómenos y se supone que el viento responsable del proceso advectivo no contiene componente vertical, por lo cual el fenómeno de propagación se considera bidimensional.

Sea D un dominio acotado bidimensional (conexo y simplemente conexo) con frontera abierta S , y sean $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i) \in D$, $i = 1..N$, los puntos donde se ubican las fuentes industriales que emiten una especie contaminante con tasas respectivas $Q_i(t)$, $i = 1 \dots N$. Se denota con $\phi(\mathbf{r}, t)$ a la concentración, dentro de la región D , de la sustancia contaminante en el punto \mathbf{r} al tiempo t .

Es importante destacar que se supone que la región de estudio D contiene a todas las fuentes puntuales de emisión del contaminante, y por lo tanto, no habrá contribuciones externas a la polución dentro de D . Tomando en cuenta esto en el balance de masa la propagación del contaminante se puede describir a través del siguiente sistema de ecuaciones:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) = f(\mathbf{r}, t) \quad \text{en } D \times (0, T), \quad (2.1)$$

$$\phi(\mathbf{r}, 0) = \phi^0(\mathbf{r}) \quad \text{en } D, \quad (2.2)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} - U_n \phi = 0 \quad \text{en } S^-, \quad (2.3)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{en } S^+, \quad (2.4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad \text{en } D. \quad (2.5)$$

Donde $\mathbf{U} = \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$ denota la velocidad del viento en D y se supone que cumple la ecuación de continuidad (2.5). $\sigma = \sigma(\mathbf{r}, t) > 0$ y $\mu = \mu(\mathbf{r}, t) > 0$ son los coeficientes de transformación química de la especie contaminante y difusión turbulenta, respectivamente, y $f(\mathbf{r}, t)$ es el forzamiento formado por las fuentes puntuales de emisión del contaminante

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

La ecuación (2.2) define a ϕ^0 como la distribución espacial de la especie contaminante al tiempo $t = 0$ sobre D , es decir, ϕ^0 es el residuo del contaminante en la atmósfera que dejó la actividad industrial en un intervalo de tiempo pasado (por ejemplo el día anterior).

La frontera S se ha dividido en dos partes dependiendo de si el flujo entra a D o sale, es decir, S^+ se define como los puntos de S tal que $U_n = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} \geq 0$, donde \mathbf{n} es el vector normal exterior, y S^- se define como el complemento ($U_n = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} < 0$). La condición de frontera (2.3) establece que cuando el viento ingresa a la región D el flujo total del contaminante, tomando en cuenta difusión y advección, es igual a cero, por lo cual, en S^- no hay salida o entrada de la especie contaminante. La condición de frontera (2.4) establece que cuando el viento sale de la región D se desprecia el flujo difusivo turbulento en comparación con el flujo advectivo del contaminante, y por lo tanto, la salida de la especie contaminante sólo es por advección. Estas condiciones de frontera fueron definidas por Marchuk^[19] y generalizadas al caso de tres dimensiones por Skiba^[41].

En general, la dispersión de contaminantes emitidos a la atmósfera por fuentes fijas o móviles es un fenómeno tridimensional no-estacionario. Sin embargo, un modelo de dispersión bidimensional como (2.1)-(2.5) se justifica al considerar los contaminantes en una capa de la atmósfera de altura h e integrar en la vertical el modelo tridimensional. Esto último tiene especial aplicación a eventos extremos de contaminación a corto plazo. Para aclarar este punto consideremos la ecuación Euleriana tridimensional de dispersión para una especie contaminante y N fuentes puntuales:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + \sigma C - \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \\ + w \frac{\partial C}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) = F(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

donde

$$F(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \delta(z - z_i).$$

En condiciones de estabilidad atmosférica, es decir, cuando existe un débil movimiento de masa de aire en la vertical, se tiene un aumento de la concentración del contaminante cerca del suelo y donde se emite. Cuando el evento

es de gran estabilidad atmosférica (inversión térmica) se tiene que $w = 0$ y $K_z = 0$, por lo tanto, el contaminante se acumula en una delgada capa de altura h . Con estas condiciones, si se integra la ecuación de dispersión respecto la variable z en el intervalo $[0, h]$, y se divide entre h , se obtiene que

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{h} \int_0^h C dz \right) + u \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{h} \int_0^h C dz \right) + v \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{h} \int_0^h C dz \right) + \sigma \left(\frac{1}{h} \int_0^h C dz \right) +$$

$$- \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{h} \int_0^h C dz \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{h} \int_0^h C dz \right) = f(\mathbf{r}, t),$$

donde

$$f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(x - x_i) \delta(y - y_i).$$

Si se define $\phi = \frac{1}{h} \int_0^h C dz$ (concentración promedio del contaminante en una columna de altura h) finalmente se obtiene la ecuación (2.1)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + \sigma \phi - \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = f(\mathbf{r}, t).$$

En este cálculo se supone que la velocidad horizontal (u, v), el coeficiente σ de destrucción de la especie contaminante, y los coeficientes de difusión turbulenta K_x y K_y , no dependen de la altura z . Además, el intercambio de integración y derivación parcial es posible por la continuidad de C y sus primeras derivadas parciales.

Si se consideran las integraciones respectivas sobre S^+ y S^- , entonces, con el mismo cambio de variable ($\phi = \frac{1}{h} \int_0^h C dz$) se obtienen las condiciones de frontera e iniciales (2.2), (2.3) y (2.4) del modelo bidimensional, mientras que la condición (2.5) es válida desde el modelo tridimensional.

Con esto se concluye que el modelo bidimensional (2.1) - (2.5) es una aproximación al fenómeno de dispersión tridimensional en el caso de un evento extremo de contaminación. Ya que los eventos de gran estabilidad atmosférica duran unas cuantas horas, entonces se concluye que el modelo es válido a corto plazo. Sin embargo, no es de poca importancia, ya que estos eventos de intensa contaminación local a corto plazo pueden tener un gran impacto en la salud humana.

Para concluir la definición del modelo (2.1)-(2.5) es necesario aclarar el uso de la ecuación de continuidad (2.5) que cierra el modelo de dispersión, la cual es una condición de incompresibilidad.

Un fluido es llamado incompresible si su densidad no cambia con la presión. Ya que en el desplazamiento de un paquete de fluido sobre una línea de corriente el paquete está sometido a las diferencias de presión se tiene que, un fluido es incompresible si la densidad de un paquete que se mueve sobre cualquier línea de corriente del flujo se mantiene constante, es decir,

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla\rho = 0.$$

Por otra parte, si se considera la ecuación de continuidad (ecuación de conservación de masa)

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{U}) = \frac{D\rho}{Dt} + \rho\nabla \cdot \mathbf{U} = 0,$$

se obtiene que, un fluido es incompresible si y sólo si

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0.$$

Los líquidos tienen un cambio relativo de densidad sumamente bajo respecto de la presión, por lo cual se consideran incompresibles, sin embargo, los gases sí presentan compresibilidad.

Ya que el aire es una mezcla de gases es necesario establecer un rango de comportamiento en el que éste se pueda considerar como un fluido incompresible.

Si se considera la ecuación de Bernoulli

$$\Delta p = \frac{1}{2}\rho U^2,$$

se aproxima $\Delta\rho$ como $\left(\frac{d\rho}{dp}\right)\Delta p$ y se define $a^2 = \frac{dp}{d\rho}$ (velocidad local del sonido), entonces se obtiene que

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{1}{2} \frac{U^2}{a^2}.$$

De aquí se observa que el cambio relativo de la densidad es proporcional al *número de Mach*

$$M = \frac{U}{a}.$$

Por otra parte, si se considera la atmósfera hasta los 600 m (capa en donde tiene lugar la emisión y dispersión de contaminantes) se tiene que la rapidez promedio del viento U es menor a 12 m/s. Por lo tanto, el cambio relativo de la densidad del aire es aproximadamente

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = 0.006,$$

es decir, hay un cambio relativo de la densidad menor al 1% (cambio despreciable), por lo cual, el aire se considera un fluido incompresible y es posible usar la ecuación de continuidad $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$.

Un criterio generalmente aceptado para considerar a un gas como incompresible es que $M < 0.3$, esto significa que $U < 100\text{m/s}$ (aproximadamente).

2.2. Unicidad y estabilidad de la solución en el sentido clásico

Las condiciones de frontera (2.3) y (2.4) no sólo tienen un adecuado sentido físico, sino también poseen buenas características matemáticas, ya que hacen del modelo de dispersión (2.1)-(2.5) un problema bien formulado en el sentido de Hadamard^[14]; es decir, la solución del problema (2.1)-(2.5) es única y estable respecto de pequeñas perturbaciones en las condiciones iniciales, más aún, es posible mostrar que hay estabilidad respecto de pequeñas perturbaciones en el forzamiento.

Con la finalidad de establecer estas características supongamos que el problema de evolución

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + A\phi = f, \quad (2.6)$$

$$\phi(0) = \phi^0, \quad (2.7)$$

tiene al menos una solución suficientemente suave, y que $A : \Phi \subset H \rightarrow H$ es un operador diferencial lineal positivo semidefinido con dominio en un subespacio Φ de un espacio de Hilbert H . Con estas hipótesis se afirma que la solución es única y estable respecto de perturbaciones en ϕ^0 y en el forzamiento f . La demostración es la siguiente.

Multiplicando la ecuación (2.6) por ϕ y agrupando términos se tiene

$$\left(\phi, \frac{\partial \phi}{\partial t}\right) = (\phi, f) - (\phi, A\phi),$$

donde los paréntesis denotan el producto interior definido en H .

Considerando que A es positivo semidefinido, y usando la desigualdad de Schwarz^[30], es posible escribir

$$\left(\phi, \frac{\partial \phi}{\partial t}\right) \leq \|f\| \|\phi\|, \text{ donde } \|\phi\| = \sqrt{(\phi, \phi)}.$$

Si se observa que

$$\left(\phi, \frac{\partial \phi}{\partial t}\right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \|\phi\|^2 = \|\phi\| \frac{\partial}{\partial t} \|\phi\|,$$

entonces se obtiene la siguiente desigualdad:

$$\frac{\partial}{\partial t} \|\phi\| \leq \|f\|.$$

Integrando la última relación respecto del tiempo en ambos lados, y usando la condición inicial, se tiene

$$\|\phi\| \leq \int_0^t \|f\| d\tau + \|\phi^0\|,$$

suponiendo que la norma de f es acotada en el intervalo de tiempo $(0, T)$, finalmente, se puede escribir

$$\|\phi\| \leq T \cdot \max_{0 \leq t \leq T} \|f(r, t)\| + \|\phi^0\|.$$

Dado que A es un operador lineal, la última desigualdad afirma que pequeñas variaciones en f y ϕ^0 inducen pequeñas variaciones en la solución ϕ del problema de evolución, esto es estabilidad. El mismo razonamiento garantiza unicidad; es decir, si se consideran dos soluciones del problema (2.6)-(2.7), entonces, al restar las ecuaciones se tiene un problema de evolución con $\phi^0 = 0$ y $f = 0$, de esto se sigue según la desigualdad anterior que la norma de la diferencia de dichas funciones es cero.

Con este resultado general lo único que falta probar para que el modelo (2.1)-(2.5) esté bien formulado es que el operador diferencial lineal

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

definido en

$$\Phi = \left\{ \phi \in C^2(\bar{D}) \mid \mu \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} - U_n \phi = 0 \text{ en } S^- \text{ y } \mu \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ en } S^+ \right\} \subset L_2(\bar{D}),$$

es positivo semidefinido. Para esto se considera el producto interior en $L_2(\bar{D})$ de $A\phi$ con ϕ ,

$$(A\phi, \phi) = \int_D \phi \mathbf{U} \cdot \nabla \phi \, dr + \int_D \sigma \phi^2 \, dr - \int_D \phi \nabla \cdot \mu \nabla \phi \, dr. \quad (2.8)$$

Ya que $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$ se tiene que $\nabla \cdot (\phi^2 \mathbf{U}) = 2\phi \mathbf{U} \cdot \nabla \phi$. Si se integra este resultado, y se usa el teorema de la divergencia, entonces se puede escribir

$$\int_D \phi \mathbf{U} \cdot \nabla \phi \, dr = \frac{1}{2} \int_S \phi^2 \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} \, dS = \frac{1}{2} \left[\int_{S^+} \phi^2 U_n \, dS + \int_{S^-} \phi^2 U_n \, dS \right]. \quad (2.9)$$

Por otra parte, se tiene la relación $\nabla \cdot (\phi \mu \nabla \phi) = \phi \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) + \mu |\nabla \phi|^2$. Si se integra ésta, y se usa el teorema de la divergencia, entonces se obtiene

$$- \int_D \phi \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) \, dr = \int_D \mu |\nabla \phi|^2 \, dr - \int_S \phi \mu \nabla \phi \cdot \mathbf{n} \, dS,$$

si la última integral se separa en S^+ y S^- , y se aplican las condiciones de frontera (2.3)-(2.4), finalmente se tiene que

$$- \int_D \phi \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) \, dr = \int_D \mu |\nabla \phi|^2 \, dr - \int_{S^-} \phi^2 U_n \, dS. \quad (2.10)$$

Si se sustituye en (2.8) las fórmulas integrales (2.9) y (2.10), y se recuerda que $U_n < 0$ en S^- , entonces se concluye que

$$(A\phi, \phi) = \int_D \left[\sigma \phi^2 + \mu |\nabla \phi|^2 \right] \, dr + \frac{1}{2} \left[\int_{S^+} \phi^2 U_n \, dS - \int_{S^-} \phi^2 U_n \, dS \right] \geq 0, \quad \phi \in \Phi.$$

Con esto queda demostrado que el operador diferencial A es positivo semidefinido.

Otra ventaja de que el operador diferencial lineal en el modelo (2.1)-(2.5) sea positivo semidefinido es que algunos de los esquemas de discretización numérica, basados en diferencias finitas, preservan esta propiedad, y por lo tanto, es fácil establecer la existencia, unicidad y estabilidad de la solución en el problema de dispersión discreto. Además, es posible usar métodos de separación de operadores por componentes, y por lo tanto, trasladar el

problema de dos (tres) dimensiones a dos (tres) problemas simples en una dimensión, lo cual siempre representa una ventaja computacional ya que ahorra memoria y tiempo de cómputo.

Ecuación de Balance

Las condiciones de frontera (2.3)-(2.4) son fundamentales para establecer que el modelo de dispersión está bien formulado, de hecho, es posible aplicar éstas para mostrar que el modelo satisface una ecuación de balance de masa consistente con el fenómeno en estudio. Para llegar a esta ecuación se integra (2.1) sobre el dominio D ,

$$\int_D \frac{\partial \phi}{\partial t} d\mathbf{r} + \int_D \sigma \phi d\mathbf{r} + \int_D \mathbf{U} \cdot \nabla \phi d\mathbf{r} - \int_D \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) d\mathbf{r} = \int_D \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) d\mathbf{r} . \quad (2.11)$$

Si consideramos que $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$ se tiene la igualdad $\nabla \cdot (\phi \mathbf{U}) = \mathbf{U} \cdot \nabla \phi$; si se aplica ésta última a la tercera integral junto con el teorema de la divergencia se tiene que

$$\int_D \mathbf{U} \cdot \nabla \phi d\mathbf{r} = \int_{S^+} \phi U_n dS + \int_{S^-} \phi U_n dS .$$

Si se aplica el teorema de la divergencia a la cuarta integral y se usa la condición de frontera (2.4) se escribe

$$\int_D \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) d\mathbf{r} = \int_{S^-} \mu \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} dS .$$

Al sustituir las dos últimas integrales en la ecuación (2.11), junto con la condición de frontera (2.3), finalmente se obtiene que

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^N Q_i(t) - \int_D \sigma \phi d\mathbf{r} - \int_{S^+} \phi U_n dS , \quad (2.12)$$

donde a la integral del lado derecho en la ecuación (2.11) se le aplicó la propiedad integral de la función delta de Dirac:

$$\int_D f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) d\mathbf{r} = f(\mathbf{r}_0) .$$

La ecuación (2.12) es la *ecuación de balance de masa*. Esta ecuación indica que la variación de la masa total de la especie contaminante en el dominio D es igual a la suma de las tasas con que se suministra, menos la tasa de

destrucción total por reactividad química, menos la pérdida de masa contaminante que escapa por la frontera debido a la advección (notar que $U_n \geq 0$ en S^+), lo cual es consistente con el fenómeno de dispersión y transformación.

Con una sucesión similar de cálculos es también posible establecer la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi^2 dr = & 2 \sum_{i=1}^N Q_i(t) \phi(r_i, t) - 2 \int_D (\sigma \phi^2 + \mu |\nabla \phi|^2) dr \\ & - \int_{S^+} U_n \phi^2 dS + \int_{S^-} U_n \phi^2 dS. \end{aligned}$$

Esta ecuación y (2.12) determinan que cuando $Q_i(t) = 0 \forall i$, entonces $\int_D \phi dr$ y $\int_D \phi^2 dr$ decrecen con el tiempo (notar que $U_n < 0$ en S^-). Además, si $\mu = 0$, $\sigma = 0$, y $U_n = 0$ sobre la frontera S , entonces ambas integrales se conservan en el tiempo, es decir,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi dr = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi^2 dr = 0.$$

Estas relaciones son útiles para probar el buen funcionamiento de los algoritmos numéricos que se presentan en el Capítulo 5.

2.3. Existencia, unicidad, y estabilidad de una solución débil

Con el fin de mostrar la existencia de una solución débil para el modelo de dispersión se introducen los siguientes espacios de funciones y normas.

Sea $Q = \bar{D} \times [0, T]$, y $L_2(Q)$ el espacio de Hilbert de funciones de valores reales definidas en Q con el producto interior

$$\langle f, g \rangle = \int_Q f(\mathbf{r}, t) g(\mathbf{r}, t) dr dt,$$

y la norma

$$\|g\| = \langle g, g \rangle^{\frac{1}{2}}.$$

Sea M el conjunto de funciones $\phi(\mathbf{r}, t)$ con segundas derivadas parciales continuas en el dominio cerrado $\bar{Q} = \bar{D} \times [0, T]$ que satisfacen la condición inicial $\phi(\mathbf{r}, 0) = 0$.

Para estas funciones se considera la norma finita

$$\|\phi\|_H = \left(\|\phi_t\|^2 + \|\phi_x\|^2 + \|\phi_y\|^2 + \|\phi\|_S^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.13)$$

donde ϕ_t, ϕ_x y ϕ_y denotan las primeras derivadas parciales de la función escalar ϕ , y

$$\|\phi\|_S = \left\{ \int_0^T \int_{S^+} |\phi|^2 dS dt \right\}^{\frac{1}{2}}$$

es la norma en $L_2(S^+)$ de la restricción de la función $\phi(r, t)$ sobre la sección de frontera S^+ .

De esta forma el correspondiente producto interior sobre M está definido por

$$\langle \phi, \varphi \rangle_H = \langle \phi_t, \varphi_t \rangle + \langle \phi_x, \varphi_x \rangle + \langle \phi_y, \varphi_y \rangle + \langle \phi, \varphi \rangle_S,$$

donde

$$\langle \phi, \varphi \rangle_S = \int_0^T \int_{S^+} \phi \varphi dS dt.$$

Se denota por $H(Q)$ el espacio de Hilbert obtenido por la cerradura del conjunto M en la norma (2.13).

Lema 2.1. En el espacio $H(Q)$ la norma $\|g\|_H$ es equivalente a la norma $(\|g\|^2 + \|g\|_H^2)^{\frac{1}{2}}$.

Demostración. Es suficiente mostrar que

$$\left(\|g\|^2 + \|g\|_H^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq C \|g\|_H. \quad (2.14)$$

Ya que $g(r, 0) = 0$, entonces

$$g(r, t) = \int_0^t \frac{\partial g(r, \tau)}{\partial \tau} d\tau,$$

por lo cual

$$\|g\|^2 = \int_Q \left(\int_0^t \frac{\partial g(r, \tau)}{\partial \tau} d\tau \right)^2 dr dt \leq T^2 \|g_t\|^2 \leq T^2 \|g\|_H^2,$$

de aquí se sigue que la desigualdad (2.14) se satisface con $C = \sqrt{1+T^2}$. \square

Se define al conjunto V como todas las funciones de la forma

$$g(\mathbf{r}, t) = \int_0^t \psi(\mathbf{r}, \tau) d\tau,$$

donde $\psi(\mathbf{r}, \tau)$ es una función de $H(Q)$. El conjunto V es denso en $H(Q)$, ya que M es denso en $H(Q)$ y la cerradura \bar{V} del conjunto V en la norma (2.13) contiene a M .

Definición. Una función $\phi(\mathbf{r}, t)$ del espacio $H(Q)$ es una solución débil para el modelo de dispersión (2.1)-(2.5) si satisface la identidad:

$$\langle \phi_t, g_t e^{-\delta t} \rangle + \langle \mu \phi_x, g_{tx} e^{-\delta t} \rangle + \langle \mu \phi_y, g_{ty} e^{-\delta t} \rangle + \langle \sigma \phi, g_t e^{-\delta t} \rangle +$$

$$\int_0^T \int_{S^+} U_n \phi g_t e^{-\delta t} dS dt + \langle u \phi_x, g_t e^{-\delta t} \rangle + \langle v \phi_y, g_t e^{-\delta t} \rangle = \langle f, g_t e^{-\delta t} \rangle, \quad (2.15)$$

para cualquier función $g(\mathbf{r}, t)$ del conjunto V y para algún $\delta > 0$.

Ya que $\phi(\mathbf{r}, t)$ pertenece a $H(Q)$, y que $g(\mathbf{r}, t)$ pertenece a V , entonces todos los términos de (2.15) están bien definidos. Formalmente, es posible derivar (2.15) multiplicando (2.1) por la función $g_t e^{-\delta t}$ e integrando por partes, posteriormente se aplican las condiciones de frontera (2.3) y (2.4). La solución definida de esta forma es una generalización de la solución clásica del modelo (2.1)-(2.5), y hay que notar que si $g_t e^{-\delta t} \equiv 1$, entonces (2.15) coincide con la ecuación de balance (2.12) integrada en $(0, T)$. Es importante observar que la función $g_t e^{-\delta t}$ es una estructura estandar que permite realizar algunas estimaciones importantes en el proceso de la construcción de una solución débil.

Teorema 2.1. Sean $U(\mathbf{r})$ la velocidad del viento, $\mu(\mathbf{r})$ el coeficiente de difusión, $Q_i(t) \in L_2(0, T)$ ($i = 1..N$) las tasas puntuales de emisión, y

$$\max_Q \{ \mu, \sigma, |\sigma_i|, |U| \} = \beta < \infty, \quad \min_Q \{ \mu, \sigma \} = \alpha > 0.$$

Entonces el problema (2.1)-(2.5), con la condición inicial $\phi(\mathbf{r}, 0) = 0$, tiene una solución débil $\phi(\mathbf{r}, t)$ en el espacio $H(Q)$, la cual es única y depende continuamente del forzamiento y la condición inicial.

Demostración. I) Existencia de una solución débil.

Sean $a_i(\phi, g)$ ($i = 1..7$) los términos del lado izquierdo en (2.15) y $a_8(\phi, g)$ el término en el lado derecho. Dado $g(r, t)$ en V , cada $a_i(\phi, g)$ es una funcional lineal acotada en ϕ definida en $H(Q)$. Se sigue entonces que

$$|a_1(\phi, g)| = \left| \langle \phi_t, g_t e^{-\delta t} \rangle \right| \leq \|g_t e^{-\delta t}\| \|\phi_t\| \leq C_1(g) \|\phi\|_H,$$

$$|a_2(\phi, g)| = \left| \langle \mu \phi_x, g_{tx} e^{-\delta t} \rangle \right| \leq \beta \|g_{tx} e^{-\delta t}\| \|\phi_x\| = \beta \|\psi_x e^{-\delta t}\| \|\phi_x\| \leq$$

$$\beta \|\psi_x\| \|\phi_x\| \leq \beta \|\psi\|_H \|\phi\|_H \leq C_2(g) \|\phi\|_H,$$

$$|a_5(\phi, g)| = \left| \int_0^T \int_{S^+} U_n \phi g_t e^{-\delta t} dS dt \right| \leq \beta \|\psi\|_S \|\phi\|_S \leq$$

$$\beta \|\psi\|_H \|\phi\|_H \leq C_5(g) \|\phi\|_H,$$

donde $\psi = g_t \in H(Q)$. Las cotas para las formas a_i $i = 3, 4, 6$, y 7 se obtienen de forma similar.

Aplicando el Teorema de Riesz^[30] a cada una de las funcionales a_i es posible escribir

$$a_i(\phi, g) = \langle \phi, g_i \rangle_H, \quad i = 1..7,$$

para algún elemento $g_i \in H(Q)$ determinado de forma única. La correspondencia $g \rightarrow g_i$ define un operador lineal $A_i : V \rightarrow H(Q)$, esto es, $g_i = A_i g$ ($i = 1..7$).

Ya que $Q_i(t) \in L_2(0, T)$ ($i = 1..N$), entonces el forzamiento f también pertenece a $L_2(Q)$. Además, para tasas de emisión fijas Q_i ($i = 1..N$) el término $a_8(f, g)$ es también una funcional lineal acotada respecto de g en $H(Q)$,

$$|a_8(f, g)| = \left| \langle f, g_t e^{-\delta t} \rangle \right| \leq \|f\| \|g_t\| \leq C_8(f) \|g\|_H,$$

y por el Teorema de Riesz puede ser representado en forma única como $a_8(f, g) = \langle R, g \rangle_H$, para algún $R \in H(Q)$.

El operador

$$A = \sum_{i=1}^7 A_i,$$

actúa de V en $H(Q)$ y se puede usar para reescribir (2.15) como

$$\langle \phi, Ag \rangle_H = \langle R, g \rangle_H. \quad (2.16)$$

El siguiente resultado sobre el operador A permite continuar con la demostración de existencia y unicidad.

Lema 2.2. Sean V y $G = AV \subseteq H(Q)$ el dominio y la imagen del operador A respectivamente. Entonces, el operador inverso A^{-1} con G como dominio existe y es acotado.

Demostración. Ver [38]. \square

Ya que el operador A^{-1} definido en G existe y es acotado, entonces por continuidad, A^{-1} se define sobre \overline{G} , donde \overline{G} es la cerradura de G en la norma (2.13).

Sea L el complemento ortogonal de G en $H(Q)$. Ahora se extiende A^{-1} de \overline{G} a $H(Q)$ al definir $A^{-1}w = 0 \forall w \in L$. De esta forma se obtiene un operador \tilde{A}^{-1} definido en todo el espacio $H(Q)$, además, $\|\tilde{A}^{-1}\|_H \leq 2e^{\delta T}$, (ver [38]). El operador adjunto $(\tilde{A}^{-1})^*$ está definido de forma única y tiene la misma norma que \tilde{A}^{-1} .

Sea $Ag = w$, donde $w \in G$. De (2.16) se tiene que

$$\langle \phi, w \rangle_H = \langle \phi, Ag \rangle_H = \langle R, g \rangle_H = \langle R, A^{-1}w \rangle_H \equiv \langle R, \tilde{A}^{-1}w \rangle_H.$$

En lugar de buscar una solución ϕ para la ecuación anterior cuando $w \in G$, se impone una condición más restrictiva, es decir,

$$\langle \phi, w \rangle_H = \langle R, \tilde{A}^{-1}w \rangle_H = \langle (\tilde{A}^{-1})^* R, w \rangle_H, \quad \forall w \in H(Q).$$

Esto es posible si y sólo si $\phi = (\tilde{A}^{-1})^* R$. Con esta definición de ϕ la ecuación (2.16), y por lo tanto (2.15), se satisfacen. Esto prueba la existencia de una solución débil en el modelo de dispersión.

II) Unicidad y dependencia continua en el forzamiento y la condición inicial.

Sea $\phi(r, t) \in H(Q)$ una solución débil del modelo de dispersión (2.1)-(2.5). Entonces

$$g(\mathbf{r}, t) = \int_0^t \phi(\mathbf{r}, \tau) e^{\delta \tau} d\tau$$

pertenece a V . Sustituyendo esta ecuación en (2.15) se obtiene

$$\frac{1}{2} \|\phi(\mathbf{r}, T)\|_{L_2(D)}^2 + \alpha (\|\phi_x\|^2 + \|\phi_y\|^2) \leq \frac{1}{2} \|\phi(\mathbf{r}, 0)\|_{L_2(D)}^2 + \langle f, \phi \rangle,$$

donde $\frac{1}{2} \|\phi(\mathbf{r}, t)\|_{L_2(D)}^2 = \int_D \phi^2(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$. De esta desigualdad y de la condición inicial $\phi(\mathbf{r}, 0) = \phi^0(\mathbf{r})$ se sigue que

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \|\phi(\mathbf{r}, T)\|_{L_2(D)}^2 + \alpha (\|\phi_x\|^2 + \|\phi_y\|^2) \leq \\ & \max_{0 \leq \tau \leq T} \|\phi(\mathbf{r}, \tau)\|_{L_2(D)} \left(\sqrt{T} \|f\| + \frac{1}{2} \|\phi^0(\mathbf{r})\|_{L_2(D)} \right) \leq \\ & |\phi|_Q \left(\sqrt{T} \|f\| + \frac{1}{2} \|\phi^0(\mathbf{r})\|_{L_2(D)} \right), \end{aligned}$$

donde $|\phi|_Q = \max_{0 \leq \tau \leq T} \|\phi(\mathbf{r}, \tau)\|_{L_2(D)} + \|\phi_x\| + \|\phi_y\|$, es llamada la *norma energética*. Con esta definición y las anteriores desigualdades es posible establecer la siguiente estimación:

$$|\phi|_Q \leq \left(\frac{2}{\sqrt{\alpha}} + \sqrt{2} \right)^2 \left(\sqrt{T} \|f\| + \frac{1}{2} \|\phi^0(\mathbf{r})\|_{L_2(D)} \right).$$

Esta desigualdad muestra que la solución débil depende continuamente del forzamiento y de la condición inicial. Ya que el modelo de dispersión (2.1)-(2.5) es lineal es posible escribir

$$|\delta\phi|_Q \leq \left(\frac{2}{\sqrt{\alpha}} + \sqrt{2} \right)^2 \left(\sqrt{T} \|\delta f\| + \frac{1}{2} \|\delta\phi^0(\mathbf{r})\|_{L_2(D)} \right),$$

lo cual muestra la unicidad de la solución. \square

La demostración del teorema anterior usa en la parte de existencia la condición inicial $\phi(\mathbf{r}, 0) = 0$. Con el fin de generalizar el resultado al caso $\phi(\mathbf{r}, 0) = \phi^0(\mathbf{r}) \neq 0$ sólo hay que notar que el cambio de variable

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t) - \phi^0(\mathbf{r}),$$

permite establecer un modelo en la variable φ del tipo (2.1)-(2.5), el cual tiene condición inicial $\varphi(\mathbf{r}, 0) = 0$ y forzamiento

$$F(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t) - \mathbf{U} \cdot \nabla \phi^0 - \sigma \phi^0 + \nabla \cdot (\mu \nabla \phi^0).$$

De esta forma, si $\phi^0(\mathbf{r})$ es suficientemente suave entonces $F \in L_2(Q)$, y por lo tanto, el modelo en la variable φ tiene una solución débil (Teorema 2.1). Finalmente, la solución débil del modelo no homogéneo es $\phi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t) + \phi^0(\mathbf{r})$. La unicidad y la continuidad respecto del forzamiento y la condición inicial se siguen exactamente como en el Teorema 2.1.

2.4. Definición del problema de control de emisiones

El modelo de dispersión para una especie contaminante (2.1)-(2.5) es una herramienta que permite predecir la concentración ϕ de dicha sustancia, en cada punto de la región de estudio D y para cada tiempo $t > 0$, a través de la simulación numérica (Capítulo 5). Esto significa que es posible conocer que tan grave será la contaminación en toda la región D , debido a la suma del contaminante que se emite por las fuentes puntuales con tasas $Q_i(t)$ $i = 1..N$, y por la distribución inicial $\phi^0(\mathbf{r})$ de la sustancia. Cuando el pronóstico de la concentración promedio del contaminante es menor que la norma sanitaria respectiva (Tabla 1.1), entonces las fuentes de emisión pueden trabajar al mismo ritmo, es decir, con la tasas de emisión $Q_i(t)$ $i = 1..N$. Sin embargo, si en el pronóstico la concentración promedio excede la norma de calidad del aire, entonces se deben tomar acciones para evitar este evento. En este caso las acciones consistirán en restringir (acotar) o redefinir las tasas de emisión de cada fuente puntual de tal forma que sí se cumpla la norma de calidad del aire. Una acción de este tipo (control de emisiones) debe tener la característica de ser inmediata, es decir, debe ser posible construir las nuevas tasas de emisión en un tiempo breve posterior a un mal pronóstico de contaminación, ya que el objetivo es aplicarlas y evitar el evento.

Es posible que dentro de la región de estudio D exista una zona de especial sensibilidad que represente el objeto de protección; por lo tanto, sin pérdida de generalidad se considera una zona Ω de importancia ecológica contenida

en D , para la cual se quiere que la concentración promedio del contaminante se mantenga en niveles aceptables. Con el fin de formular esto último se define la funcional J como sigue:

$$J = J_{\Omega, \tau}(\phi) = \frac{1}{|\Omega| \cdot \tau} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \phi(r, t) dr dt, \quad (2.17)$$

donde $|\Omega|$ es el área de la región de importancia ecológica. J representa la concentración promedio, en la región Ω y en el intervalo de tiempo $[T - \tau, T]$ de longitud $\tau > 0$, de la especie contaminante en estudio.

Además, se debe notar que, en función del tipo de sustancia contaminante, de la región que sea Ω y del tiempo por considerar en el control ($\tau > 0$), se define una concentración máxima admisible J_0 que puede ser tolerada por la acumulación de las emisiones industriales.

Considerando los factores anteriores el problema del control de las emisiones industriales se puede ahora enunciar como sigue.

Acotar o redefinir en forma adecuada las tasas de emisión $Q_i(t)$ $i = 1..N$, de tal forma que se cumpla:

$$J_{\Omega, \tau}(\phi) \leq J_0, \quad (2.18)$$

en el caso de que el modelo de dispersión (2.1)-(2.5) tenga el pronóstico: $J_{\Omega, \tau}(\phi) > J_0$.

Por la experiencia obtenida en la sección 1.3.1 se puede esperar que el problema de control de emisiones antes descrito (*Problema inverso*) no siempre tenga una solución. Este caso se puede presentar cuando el viento U es muy débil para dispersar el contaminante y la distribución inicial ϕ^0 de la sustancia es significativa, y por lo tanto, aun cuando se redefinan las tasas de emisión como $Q_i \equiv 0$, $i = 1..N$, se obtendría que $J_{\Omega, \tau}(\phi) > J_0$. Este resultado se prueba en el Capítulo 4.

Por otra parte, siempre existe una solución trivial al problema de control en el caso $\phi^0 \equiv 0$, la cual consiste en tomar $Q_i \equiv 0$, $i = 1..N$, ya que en este caso se tiene $J_{\Omega, \tau}(\phi) = 0$, y por lo tanto (2.18) se satisface para cualquier J_0 .

Finalmente, se debe tener en cuenta que si hay una solución no trivial al problema de control, entonces, por linealidad del modelo (2.1)-(2.5) y de la funcional (2.17) se tienen una infinidad de soluciones, las cuales consisten en tomar fracciones de las tasas redefinidas (se prueba en el Capítulo 4). Esto representa una ventaja ya que se pueden buscar en este universo de soluciones aquellas tasas que sean más adecuadas a cada factoría.

Capítulo 3

Modelo adjunto de dispersión

En este capítulo se deriva la estimación adjunta para la concentración promedio del contaminante en una zona Ω de importancia ecológica. Esta estimación dual usa la solución de un modelo diferencial adjunto, y tiene la ventaja de exhibir en forma explícita la influencia que la distribución inicial del contaminante y las tasas de emisión tienen sobre la concentración promedio de dicha sustancia sobre Ω . Esta reformulación proporciona una técnica efectiva y económica en el estudio de la sensibilidad del problema de dispersión. En particular, provee una técnica eficiente para el análisis y solución del problema de control de emisiones industriales.

En general, las estimaciones directa y adjunta son elementos complementarios que permiten comprender los diferentes aspectos del modelo ambiental y dar solución a los problemas de reubicación^[19] y control de industrias^[26,27].

Durante las últimas dos décadas se han desarrollado varias aplicaciones de las ecuaciones adjuntas en oceanología^[40] y meteorología dinámica. Marchuk ([23, 24]) sugirió el uso de las soluciones de las ecuaciones adjuntas para estimar el promedio en espacio y tiempo de la anomalía de campos meteorológicos, y para estudiar la respuesta lineal de los modelos a las variaciones en las condiciones iniciales y el forzamiento. Una de las primeras aplicaciones de estas ideas fue el estudio del modelo lineal global tridimensional de la interacción térmica de la troposfera con los océanos y continentes, donde las soluciones adjuntas fueron construidas por Marchuk y Skiba [21], y Skiba [42].

Se puede decir, en general, que esta idea de introducir ecuaciones adjuntas ya ha demostrado ser fructífera cuando se aplica en campos de la física matemática y computación matemática^[8,11] tales como: física de la atmósfera y del océano, procesamiento y asimilación de datos, mecánica

de los medios continuos, mecánica cuántica, sistemas integrables, ecología, modelos matemáticos en inmunología y control óptimo; tanto en problemas lineales^[19,27] como en modelos no-lineales^[43].

3.1. Operador adjunto

La definición de *operador adjunto* para un operador definido en un espacio de Hilbert (generalmente un espacio de funciones con ciertas características de integrabilidad y/o diferenciabilidad), tiene como objetivo generalizar la propiedad que poseen las matrices traspuestas respecto del producto interior en el espacio euclidiano real, es decir,

$$(Ax, y) = (x, A^t y),$$

donde A es una matriz real $n \times n$, y $x, y \in \mathbb{R}^n$.

Con esta analogía, la definición general para operador adjunto es la siguiente.

Definición. Sea H un espacio de Hilbert con producto interior denotado por (\cdot, \cdot) , y $L : H \rightarrow H$ un operador lineal con dominio $\Phi \subset H$ (Φ subespacio lineal de H). El operador adjunto de L es un operador lineal $L^* : H \rightarrow H$, con dominio $\Phi^* \subset H$ (Φ^* subespacio lineal de H), que satisface la *identidad de Lagrange*:

$$(L\phi, g) = (\phi, L^*g) \quad \forall \phi \in \Phi \quad y \quad \forall g \in \Phi^*. \quad (3.1)$$

Existencia del operador adjunto.

Bajo las características de la definición anterior para el operador L el adjunto existe, es decir, siempre es posible construir un operador L^* que cumpla la igualdad (3.1). Para esto, se define al conjunto Φ^* como el subconjunto más grande de H tal que, $g \in \Phi^*$ si y sólo si la funcional lineal $\phi \mapsto (L\phi, g)$ es acotada.

Φ^* es un conjunto no vacío ya que $0 \in \Phi^*$. Además, Φ^* es un subespacio lineal de H , ya que para $g_1, g_2 \in \Phi^*$ y $a, b \in \mathbb{R}$ se tiene

$$\frac{|(L\phi, ag_1 + bg_2)|}{\|\phi\|} \leq \frac{|a| |(L\phi, g_1)| + |b| |(L\phi, g_2)|}{\|\phi\|} \leq |a| C_1 + |b| C_2, \quad \phi \in \Phi - \{0\}.$$

Por otra parte, si $g \in \Phi^*$ entonces, por el Teorema de Riesz^[30], existe un único $\nu \in H$ tal que

$$(L\phi, g) = (\phi, \nu).$$

Se define entonces el operador $L^* : \Phi^* \rightarrow H$ como: $L^*g = \nu$. Este operador está bien definido por la unicidad de ν , y de acuerdo con la última igualdad satisface

$$(L\phi, g) = (\phi, L^*g), \forall \phi \in \Phi \quad y \quad \forall g \in \Phi^*,$$

es decir, L^* es el operador adjunto.

Unicidad del operador adjunto.

En general, el operador adjunto no es único según la definición dada anteriormente, ya que de acuerdo a la construcción anterior, si el operador L^* se restringe a cualquier subespacio propio de Φ^* , entonces también la restricción satisface (3.1).

Con el fin de establecer unicidad se supone que Φ es un subespacio denso en H y se considera a L^* con dominio maximal; es decir, Φ^* es el mayor subespacio donde se cumple (3.1). Bajo estas condiciones, si F^* es un adjunto, entonces $Dom_{F^*} \subset \Phi^*$ (de lo contrario L^* se puede expandir al subespacio $Dom_{F^*} + \Phi^*$ y Φ^* no sería maximal), y por lo tanto, para $g \in Dom_{F^*}$ se tiene que

$$(L\phi, g) = (\phi, F^*g) = (\phi, L^*g), \forall \phi \in \Phi,$$

es decir,

$$(\phi, F^*g - L^*g) = 0, \forall \phi \in \Phi.$$

Por otra parte, si $(\phi, h) = 0 \forall \phi \in \Phi$, entonces $h = 0$. Esta afirmación es cierta por la densidad de Φ , ya que existe una sucesión en este conjunto tal que $\phi_n \rightarrow h$, y por lo tanto, si $h \neq 0$ entonces

$$\|\phi_n - h\|^2 = \|\phi_n\|^2 + \|h\|^2 \geq \|h\|^2 > 0,$$

que contradice la convergencia. Por lo cual $h = 0$.

Con este último resultado se concluye que $F^*g - L^*g = 0$, es decir, F^* es sólo una restricción de L^* ; en este sentido L^* es único.

Es importante destacar que, en general, el operador lineal L y su adjunto son diferentes. Sólo en algunos casos particulares, como el operador de Laplace con condiciones Dirichlet o Neumann homogéneas, se tiene que $L = L^*$ ($\Phi = \Phi^*$), en tales casos el operador L se denomina *autoadjunto*. El caso $L \neq L^*$ pero $\Phi = \Phi^*$ es importante, ya que se transmiten propiedades cuando alguno de los dos operadores satisface una característica, por ejemplo, si L es definido positivo, entonces

$$(L^*g, g) = (g, L^*g) = (Lg, g) > 0, \forall g \in \Phi.$$

Por último, se consideran algunos ejemplos sencillos de operador adjunto donde se destaca la importancia de la identidad de Lagrange (3.1).

1. Si $A \in M_{n \times n}(\mathbb{R})$, entonces el operador adjunto es la matriz traspuesta A^t , y en este caso, autoadjunto significa que A es simétrica ($A = A^t$).
2. Si $L\phi = k\phi$ con $\Phi = L_2(0, 1)$, entonces $L^*g = kg$ con $\Phi^* = \Phi$, ya que

$$(L\phi, g) = (k\phi, g) = (\phi, kg) = (\phi, L^*g),$$

y por lo tanto L es autoadjunto.

3. Si $L\phi = u \frac{d\phi}{dx}$ con $\Phi = \{\phi \in C^1[0, 1] \mid \phi(0) = \phi(1)\} \subset L_2(0, 1)$, entonces $L^*g = -u \frac{dg}{dx}$ con $\Phi^* = \Phi$, ya que

$$(L\phi, g) = \int_0^1 u \frac{d\phi}{dx} g dx = u \left[g\phi \Big|_0^1 - \int_0^1 \frac{dg}{dx} \phi dx \right] = \int_0^1 \phi \left(-u \frac{dg}{dx} \right) dx = (\phi, L^*g),$$

y por lo tanto L y L^* son operadores antisimétricos, es decir, $(L\phi, \phi) = (L^*g, g) = 0$.

4. Si $L\phi = \mu \frac{d^2\phi}{dx^2}$ con $\Phi = \{\phi \in C^2[0, 1] \mid \phi'_+(0) = \phi'_-(1) = 0\} \subset L_2(0, 1)$, entonces $L^*g = \mu \frac{d^2g}{dx^2}$ con $\Phi^* = \Phi$, ya que

$$\begin{aligned} (L\phi, g) &= \int_0^1 \mu \frac{d^2\phi}{dx^2} g dx = \mu \left[g\phi' \Big|_0^1 - \left(g'\phi \Big|_0^1 - \int_0^1 \frac{d^2g}{dx^2} \phi dx \right) \right] \\ &= \int_0^1 \phi \left(\mu \frac{d^2g}{dx^2} \right) dx = (\phi, L^*g), \end{aligned}$$

y por lo tanto L es autoadjunto.

3.2. Derivación del modelo adjunto de dispersión

En esta sección se establece el modelo diferencial adjunto asociado al modelo de dispersión (2.1)-(2.5) para una sustancia contaminante en la atmósfera. Este modelo resulta ser la herramienta ideal para hacer el análisis de la sensibilidad lineal del valor promedio de la concentración de dicha sustancia en una región de importancia ecológica Ω contenida en D .

El valor promedio de la concentración del contaminante en Ω , durante el intervalo de tiempo $[T - \tau, T]$, se estima de acuerdo a la funcional (2.17):

$$J = J_{\Omega, \tau}(\phi) = \frac{1}{|\Omega| \cdot \tau} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \phi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt,$$

donde $|\Omega|$ representa el área de la región de importancia ecológica.

Se debe notar que es posible hacer un análisis de sensibilidad de J aplicando sólo el modelo de dispersión (2.1)-(2.5). Para esto, es necesario considerar la solución de (2.1)-(2.5) en un estado básico de los parámetros de modelo, y posteriormente calcular la solución con las correspondientes perturbaciones de éstos. De esta forma, la anomalía δJ es la diferencia de la concentración promedio para cada solución. Este enfoque representa una alternativa al estudio del problema de control de emisiones, ya que al perturbar las tasas de emisión, por prueba y error, se podría determinar que tanto hay que reducir dichas tasas para que la concentración promedio cumpla la norma sanitaria. Sin embargo, esto representa un gran trabajo computacional, ya que cada que se perturba un parámetro en el modelo (2.1)-(2.5), éste se tiene que resolver para calcular ϕ y estimar J . Un enfoque de este tipo no es seguro en el sentido de que siempre se hallará una solución al problema de control, además, se consume una gran cantidad de tiempo de cómputo, lo cual no sirve en el control de corto plazo. El modelo adjunto, y el principio de dualidad que origina, representan una gran ventaja sobre este tipo de enfoque.

Modelo adjunto

Para derivar el modelo adjunto se consideran las siguientes definiciones asociadas al modelo de dispersión para una especie contaminante en la atmósfera:

$$H = L_2(\bar{D} \times [0, T]), \quad L\phi = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi), \quad y$$

$$\Phi = \{\phi \in C^2(\bar{D} \times [0, T]) \mid \phi(\mathbf{r}, 0) = 0, (2.3) \text{ y } (2.4)\},$$

donde (2.3) y (2.4) significa que ϕ cumple las condiciones de frontera respectivas del modelo (2.1)-(2.5). Una forma más general para el dominio Φ es considerarlo como $H(Q)$ (sección 2.3), en ambos casos, los argumentos que se dan a continuación para definir el operador adjunto no cambian.

El operador adjunto L^* se construye a través de la identidad de Lagrange:

$$(L\phi, g) = (\phi, L^*g), \forall \phi \in \Phi \quad y \quad \forall g \in \Phi^*,$$

donde el producto interior de H está definido por: $(\varphi, \psi) = \int_0^T \int_D \varphi \psi drdt$. Se tiene entonces que

$$(L\phi, g) = \int_0^T \int_D g \frac{\partial \phi}{\partial t} drdt + \int_0^T \int_D g \mathbf{U} \cdot \nabla \phi drdt + \int_0^T \int_D g \sigma \phi drdt \\ - \int_0^T \int_D g \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) drdt,$$

donde g es una función de prueba cuyas características se determinarán en lo que sigue.

Al integrar por partes y definir $g(\mathbf{r}, T) = 0$ en D se tiene

$$\int_0^T \int_D g \frac{\partial \phi}{\partial t} drdt = - \int_0^T \int_D \phi \frac{\partial g}{\partial t} drdt.$$

Si se considera (2.5), y el teorema de la divergencia, se deduce que

$$\int_0^T \int_D g \mathbf{U} \cdot \nabla \phi drdt = \int_0^T \int_{S^+} g \phi U_n dSdt + \int_0^T \int_{S^-} g \phi U_n dSdt - \int_0^T \int_D \phi \mathbf{U} \cdot \nabla g drdt.$$

Por otra parte, al usar (2.5), (2.3), (2.4) y el teorema de la divergencia, se puede escribir

$$\int_0^T \int_D g \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) drdt = \int_0^T \int_{S^-} \mu g \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} dSdt - \int_0^T \int_{S^+} \mu \phi \frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} dSdt \\ - \int_0^T \int_{S^-} \mu \phi \frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} dSdt + \int_0^T \int_D \phi \nabla \cdot (\mu \nabla g) drdt.$$

Al definir $\mu \frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} = 0$ en S^- y $\mu \frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} + U_n g = 0$ en S^+ se obtiene, sumando las tres últimas ecuaciones, que

$$(L\phi, g) = \int_0^T \int_D \phi \left(-\frac{\partial g}{\partial t} - \mathbf{U} \cdot \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot (\mu \nabla g) \right) dr dt = (\phi, L^*g),$$

es decir,

$$L^*g = -\frac{\partial g}{\partial t} - \mathbf{U} \cdot \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot (\mu \nabla g),$$

y su dominio Φ^* está dado por las funciones $g \in C^2(\bar{D} \times [0, T])$ tales que

$$g(\mathbf{r}, T) = 0 \text{ en } D, \mu \frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ en } S^- \text{ y } \mu \frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} + U_n g = 0 \text{ en } S^+.$$

El modelo adjunto se establece igualando L^* con un forzamiento $p(\mathbf{r}, t)$ por definir, es decir,

$$-\frac{\partial g}{\partial t} - \mathbf{U} \cdot \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot (\mu \nabla g) = p(\mathbf{r}, t) \quad D \times (0, T), \quad (3.2)$$

$$g(\mathbf{r}, T) = 0 \quad D, \quad (3.3)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad S^-, \quad (3.4)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} + U_n g = 0 \quad S^+. \quad (3.5)$$

El modelo diferencial (3.2)-(3.5) es un problema de valores finales. Este problema está bien formulado en el sentido de Hadamard si se resuelve de $t = T$ a $t = 0$. Más aún, ya que al reformular las ecuaciones con el cambio de variable: $t' = T - t$ y $\mathbf{U}' = -\mathbf{U}$, se obtiene que el modelo (3.2)-(3.5) tiene la misma estructura que el modelo de valor inicial (2.1)-(2.5), entonces, es posible probar la existencia, la unicidad y la estabilidad de la solución del modelo adjunto exactamente como en la sección 2.3. Este resultado se establece en el siguiente teorema.

Teorema 3.1. Sea $p(\mathbf{r}, t) \in L_2(\bar{D} \times [0, T])$. Si se considera que todos los coeficientes en el problema adjunto (3.2)-(3.5) satisfacen las condiciones del Teorema 2.1, entonces, en el espacio $H(Q)$, el problema adjunto tiene una solución débil que es única, y que depende continuamente del forzamiento y la condición inicial.

3.3. Principio de dualidad y análisis de sensibilidad

Con el fin de reformular la concentración promedio $J_{\Omega, \tau}$ en función de la solución g del modelo adjunto (3.2)-(3.5) se considera el siguiente producto respecto $L_2(\bar{D} \times [0, T])$, donde ϕ es la solución del modelo de dispersión (2.1)-(2.5),

$$(L\phi, g) = \sum_{i=1}^N \int_0^T \int_D Q_i(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) g(\mathbf{r}, t) \, d\mathbf{r} \, dt = \sum_{i=1}^N \int_0^T Q_i(t) g(\mathbf{r}_i, t) \, dt. \quad (3.6)$$

Por otra parte, también se tiene que

$$(L\phi, g) = \int_0^T \int_D \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) \right) g(\mathbf{r}, t) \, d\mathbf{r} \, dt.$$

Si se aplican las condiciones de frontera e iniciales que satisfacen las soluciones ϕ y g respectivamente, entonces, realizando los cálculos en forma similar a los de la sección 3.2 se obtiene

$$(L\phi, g) = \int_0^T \int_D \left(-\frac{\partial g}{\partial t} - \mathbf{U} \cdot \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot (\mu \nabla g) \right) \phi(\mathbf{r}, t) \, d\mathbf{r} \, dt - \int_D \phi^0(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}, 0) \, d\mathbf{r},$$

es decir,

$$(L\phi, g) = \int_0^T \int_D p(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t) \, d\mathbf{r} \, dt - \int_D \phi^0(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}, 0) \, d\mathbf{r}. \quad (3.7)$$

Igualando (3.6) y (3.7) se tiene

$$\int_0^T \int_D p(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t) \, d\mathbf{r} \, dt = \sum_{i=1}^N \int_0^T Q_i(t) g(\mathbf{r}_i, t) \, dt + \int_D \phi^0(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}, 0) \, d\mathbf{r}.$$

Con esta última ecuación, y la siguiente definición para el forzamiento p ,

$$p(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} \frac{1}{|\Omega| \tau}, & (\mathbf{r}, t) \in \Omega \times (T - \tau, T) \\ 0, & (\mathbf{r}, t) \notin \Omega \times (T - \tau, T) \end{cases},$$

se obtiene el *principio de dualidad* para la concentración promedio del contaminante en una zona de importancia ecológica Ω ,

$$J = J_{\Omega, \tau}(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T Q_i(t)g(r_i, t) dt + \int_D \phi^0(r)g(r, 0) dr. \quad (3.8)$$

Esta ecuación muestra la dependencia explícita que tiene la concentración promedio del contaminante en Ω respecto de las tasas de emisión y la distribución inicial del contaminante en D , y es importante notar que la solución g del problema adjunto (3.2)-(3.5) no depende de estos parámetros. Por lo tanto, g sólo es una función de peso que pondera a ϕ^0 y a las tasas de emisión $Q_i(t)$, $i = 1..N$. Este resultado es fundamental para resolver el problema de control de emisiones industriales (Capítulo 4).

Aun cuando las funciones solución ϕ y g permiten estimar la misma concentración promedio $J_{\Omega, \tau}$ a través de (2.17) y (3.8) respectivamente (estimaciones directa y adjunta), se debe entender que, en general, estas son funciones complementarias, ya que g en (3.8) sólo permite conocer la concentración promedio en Ω , mientras que ϕ nos permite conocer además la concentración del contaminante en todo la región de estudio D . De esta forma, dependiendo de las preguntas por contestar asociadas al problema ecológico se puede usar ϕ o g , o ambas.

Análisis de sensibilidad

La ecuación (3.8) permite hacer un análisis de sensibilidad de J respecto de los parámetros Q_i , r_i ($i = 1..N$) y ϕ^0 , manteniendo U , μ , σ , Ω y τ fijos, sin necesidad de resolver en forma repetida el problema (2.1)-(2.5); es decir, para estimar el cambio δJ , cuando hay perturbaciones δQ_i , δr_i ($i = 1..N$) y $\delta \phi^0$ respecto de un estado básico en los parámetros que definen al problema de emisiones industriales, se debe resolver sólo una vez el problema diferencial (3.2)-(3.5), almacenar la solución adjunta g , y posteriormente calcular la concentración promedio evaluando las integrales en (3.8) para el estado básico. Para todas las posibles perturbaciones se puede evaluar nuevamente (3.8) con la misma función solución g , de esta forma, δJ es la diferencia de estas nuevas estimaciones con la del estado básico. Este procedimiento representa un trabajo computacional más simple, ya que es más económico evaluar integrales que resolver cada vez un problema diferencial como el (2.1)-(2.5).

En particular, este procedimiento resulta de gran utilidad cuando se busca la ubicación, de mínimo impacto sobre Ω , de una nueva industria dentro de la región de estudio D . En este caso, hay que hacer un análisis de sensibilidad respecto de la nueva ubicación r_k para determinar el sitio más adecuado.

En una forma más general, es posible hacer un análisis de sensibilidad de J respecto de todos los parámetros en el modelo de dispersión (2.1)-(2.5). Para esto, se consideran a U , σ , μ , ϕ^0 , Q_i y r_i ($i = 1..N$), como estados básicos de los parámetros de los modelos directo y adjunto. Se denotan con δU , $\delta\sigma$, $\delta\mu$, $\delta\phi^0$, δQ_i y δr_i ($i = 1..N$), a las pequeñas perturbaciones correspondientes a estos estados. Con estas perturbaciones ϕ sufre un cambio $\delta\phi$, y por lo tanto, J cambia en δJ . El objetivo ahora es estimar δJ hasta primer orden. Para lograr esto se considera a $\phi + \delta\phi$ como la solución del siguiente problema de dispersión:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\phi + \delta\phi)}{\partial t} + (U + \delta U) \cdot \nabla(\phi + \delta\phi) + (\sigma + \delta\sigma)(\phi + \delta\phi) - \nabla \cdot ((\mu + \delta\mu)\nabla(\phi + \delta\phi)) \\ = \sum_{i=1}^N (Q_i(t) + \delta Q_i) \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_i + \delta r_i)) \quad D \times (0, T), \\ (\phi + \delta\phi)(0) = \phi^0 + \delta\phi^0 \quad D, \\ \mu \frac{\partial(\phi + \delta\phi)}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad S^+, \\ \mu \frac{\partial(\phi + \delta\phi)}{\partial \mathbf{n}} - U_n(\phi + \delta\phi) = 0 \quad S^-, \end{aligned}$$

donde δU y $\delta\mu$ se consideran nulos en la frontera S .

Si multiplicamos la primera ecuación por la solución g del modelo adjunto (3.2)-(3.5) e integramos en $D \times (0, T)$, entonces, al eliminar términos de segundo orden, se obtiene la estimación de primer orden para la anomalía δJ de la concentración promedio del contaminante en la región de importancia ecológica Ω ,

$$\begin{aligned} \delta J = \int_D g(\mathbf{r}, 0) \delta\phi^0 d\mathbf{r} + \sum_{i=1}^N \int_0^T Q_i(t) (\nabla g(\mathbf{r}_i, t) \cdot \delta r_i) dt + \sum_{i=1}^N \int_0^T \delta Q_i(t) \cdot g(\mathbf{r}_i, t) dt \\ - \int_0^T \int_D g(\mathbf{r}, t) (\delta U \cdot \nabla \phi + \delta\sigma \cdot \phi - \nabla \cdot (\delta\mu \cdot \nabla \phi)) d\mathbf{r} dt. \end{aligned}$$

Esta última ecuación nos permite hacer el análisis de sensibilidad resolviendo sólo dos problemas diferenciales, el directo (2.1)-(2.5) y el adjunto (3.2)-(3.5), lo cual sigue representando una ventaja computacional, ya que sólo hay que evaluar las integrales de la última ecuación en las perturbaciones correspondientes.

3.4. Ejemplos numéricos de dispersión y adjunción

Para mostrar el comportamiento de las soluciones de los modelos directo y adjunto se consideran dos ejemplos de dispersión de partículas de plomo desde una fuente puntual ubicada en una región de frontera abierta. Las soluciones de los modelos (2.1)-(2.5) y (3.2)-(3.5) se calculan según el esquema de aproximación numérica que se describe más adelante en el Capítulo 5.

Ejemplo 3.1. Se considera que en el dominio de frontera abierta $D = (0, 2 \text{ km}) \times (0, 2 \text{ km})$ se ubica una fuente puntual contaminante que emite partículas de plomo con una tasa estacionaria $Q_1 = 3.8 \frac{\text{kg}}{\text{hr}}$. Las coordenadas del sitio de emisión son $\mathbf{r}_1 = (1.8, 0.2)$, y se considera que al inicio de los trabajos de esta fuente la atmósfera está libre de este contaminante, es decir, $\phi^0(\mathbf{r}) = 0$ en D . Los parámetros de deposición y difusión son, respectivamente, $\sigma = 0.001 \frac{1}{\text{hr}}$ y $\mu = 0.04 \frac{\text{km}^2}{\text{hr}}$.

Se generó el campo de velocidad $\mathbf{U} = (u, v)$ con la función corriente $\psi = xy$, cuyas líneas de corriente son hipérbolas con dirección de sureste a noroeste, es decir,

$$u = -\frac{\partial \psi}{\partial y} = -x, \quad v = \frac{\partial \psi}{\partial x} = y,$$

y por lo tanto $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$.

De esta forma, las partículas de plomo alcanzan la región $\Omega = [0, 0.5] \times [0.5, 1.0]$, lo cual se observó durante las cuatro horas inmediatas al inicio de actividades de la fuente ($T = 4 \text{ hrs}$). Se calculó, según (2.17), la concentración promedio del contaminante en Ω durante el mismo periodo de tiempo ($\tau = T$), y se estimó $\mathbf{J}_{\Omega, \tau} = 2.11 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}_3}$, lo cual representa una violación a la norma sanitaria respectiva^[34] que es de $1.5 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}_3}$.

La figura 3.1.1 muestra las isolíneas de la función concentración ϕ en cada hora, y se observa un claro incremento de la especie contaminante en Ω debido al viento que va de sureste a noroeste.

La figura 3.1.2 muestra las isolíneas de la función solución g del modelo adjunto, y se observa también, durante cuatro horas ($t = 4$ a $t = 0$), el arrastre de la función escalón $p(\mathbf{r}, t)$ en la dirección $-\mathbf{U}$, es decir, de noroeste a sureste, como debe ser. También en este caso se estimó mediante (3.8) la concentración promedio, resultando de nuevo $\mathbf{J}_{\Omega, \tau} = 2.11 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}_3}$.

Finalmente, la figura 3.1.3 contiene las superficies correspondientes a la solución adjunta g en cada hora.

Ejemplo 3.2. Como en el ejemplo anterior, se considera que en el dominio de frontera abierta $D = (0, 2 \text{ km}) \times (0, 2 \text{ km})$ se ubica una fuente puntual contaminante que emite partículas de plomo con una tasa estacionaria $Q_1 = 4.0 \frac{\text{kg}}{\text{hr}}$. Las coordenadas del sitio de emisión son $r_1 = (1.8, 1.8)$, y se considera que al inicio de los trabajos de esta fuente la atmósfera está libre de este contaminante, es decir, $\phi^0(r) = 0$ en D . Los parámetros de deposición y difusión son, respectivamente, $\sigma = 0.001 \frac{1}{\text{hr}}$ y $\mu = 0.03 \frac{\text{km}^2}{\text{hr}}$.

Se generó el campo de velocidad $U = (u, v)$ con la función corriente $\psi = y - \frac{1}{2}(x-1)^3$, cuyas líneas de corriente son parábolas cúbicas con dirección de noreste a suroeste, es decir,

$$u = -\frac{\partial \psi}{\partial y} = -1, \quad v = \frac{\partial \psi}{\partial x} = -\frac{3}{2}(x-1)^2,$$

y por lo tanto $\nabla \cdot U = 0$.

De esta forma, las partículas de plomo alcanzan la región $\Omega = [0, 0.5] \times [0.5, 1.0]$, lo cual se observó durante las cuatro horas inmediatas al inicio de actividades de la fuente ($T = 4 \text{ hrs}$). Se calculó, según (2.17), la concentración promedio del contaminante en Ω durante el mismo periodo de tiempo ($\tau = T$), y se estimó $J_{\Omega, \tau} = 0.90 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}_3}$, lo cual no representa una violación a la norma sanitaria respectiva ($1.5 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}_3}$). Sin embargo, el promedio durante las últimas dos horas es ligeramente superior a la norma ($J_{\Omega, \tau} = 1.60 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}_3}$), esto se debe a que la atmósfera está limpia y el contaminante tarda más de una hora en llegar a Ω (Fig. 3.2.1), y por lo tanto, la acumulación de plomo se hace importante al final del periodo. Esto indica que es importante el intervalo de tiempo donde se hace el pronóstico de la concentración promedio, de hecho, se debe estimar el promedio hasta que el contaminante arriba a la zona que se desea proteger.

La figura 3.2.1 muestra las isolíneas de la función concentración ϕ en cada hora, y se observa un claro incremento de la especie contaminante en Ω debido al viento que va de noreste a suroeste.

La figura 3.2.2 muestra las isolíneas de la función solución g del modelo adjunto, y se observa también, durante cuatro horas ($t = 4$ a $t = 0$), el arrastre de la función escalón $p(r, t)$ en la dirección $-U$, es decir, de suroeste a noreste, como debe ser. También en este caso se estimó mediante (3.8) la concentración promedio, resultando $J_{\Omega, \tau} = 0.90 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}_3}$ en las cuatro horas, y $J_{\Omega, \tau} = 1.6 \frac{\mu\text{g}}{\text{m}_3}$ en las últimas dos horas.

Finalmente, la figura 3.2.3 contiene las superficies correspondientes a la solución adjunta g en cada hora, para el caso $\tau = 4$.

Fig. 3.1.1. Isolneas de la función concentración.

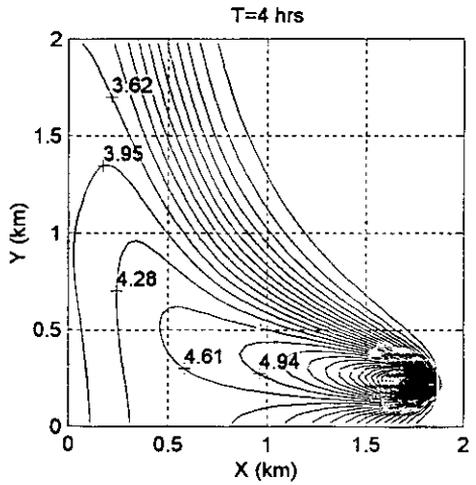
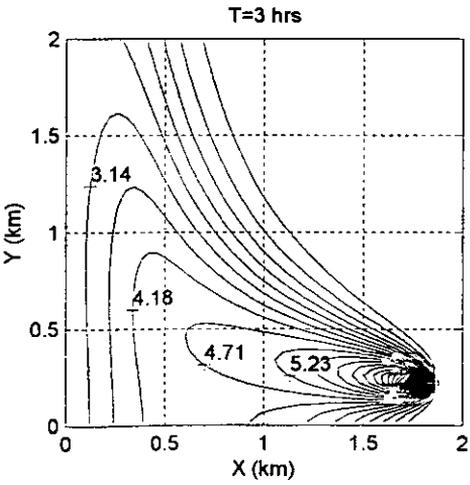
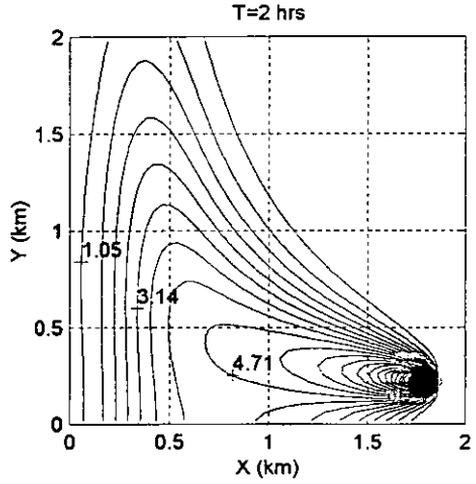
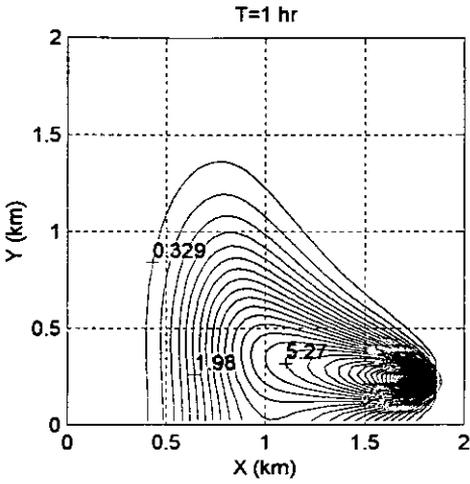


Fig. 3.1.2. Isolneas de la función adjunta.

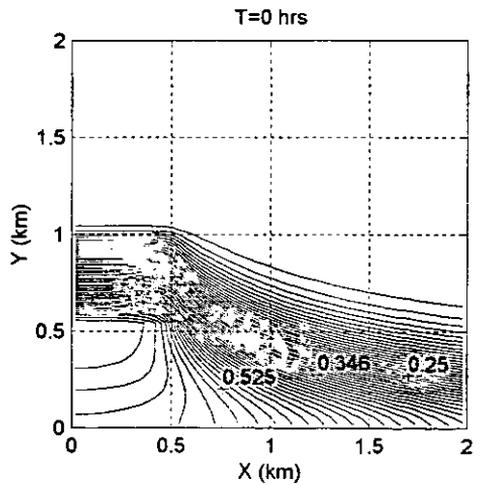
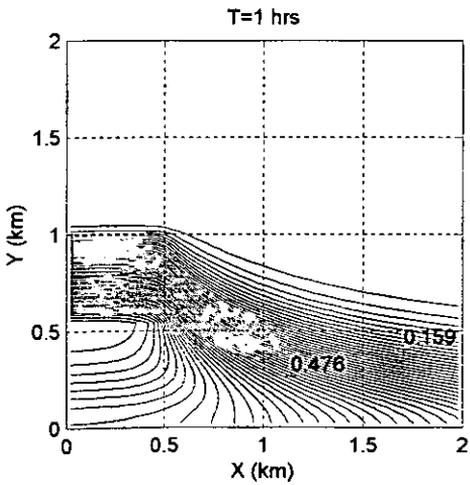
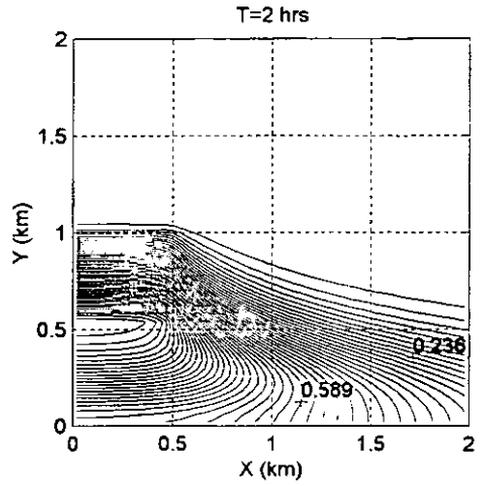
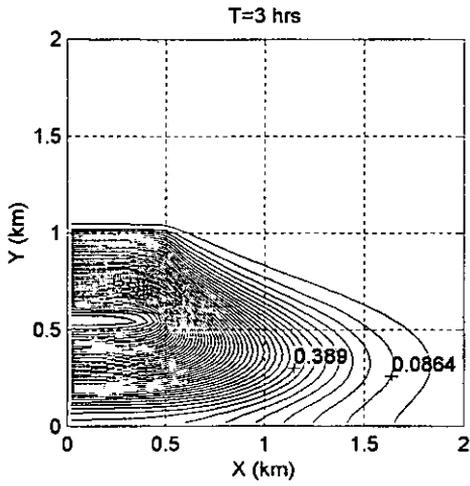


Fig. 3.1.3. Superficies de la función adjunta.

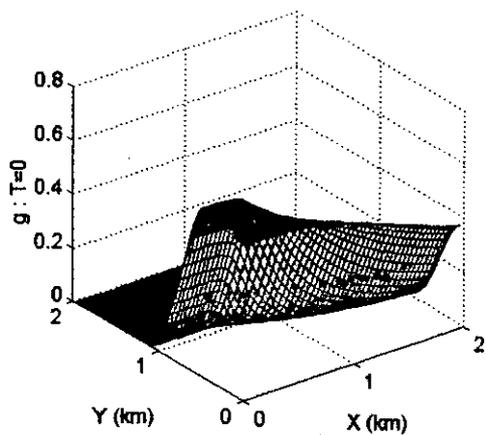
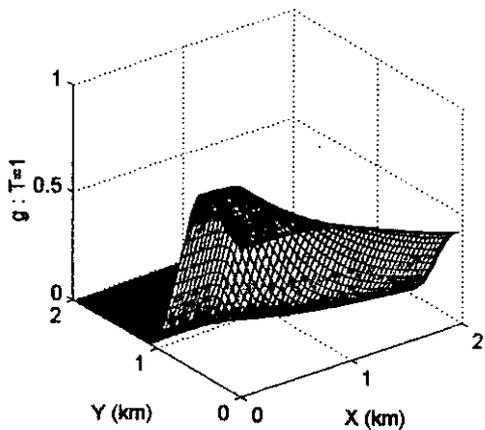
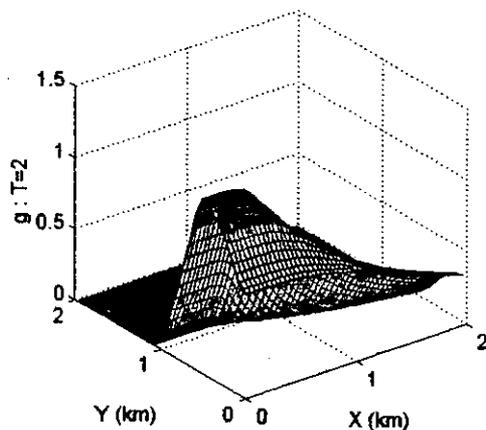
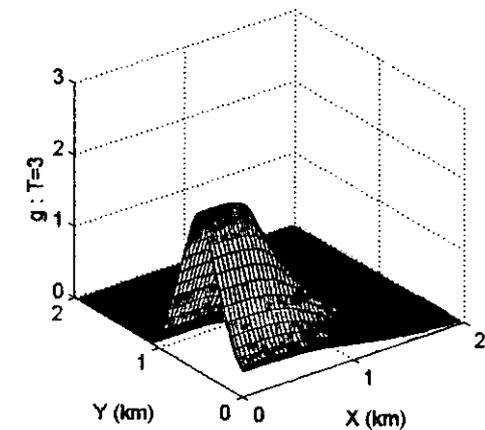


Fig. 3.2.1. Isolneas de la función concentración.

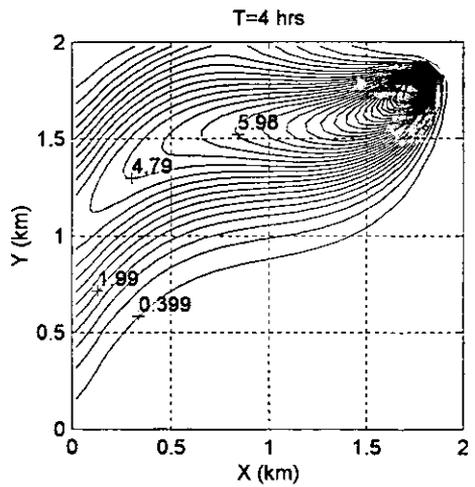
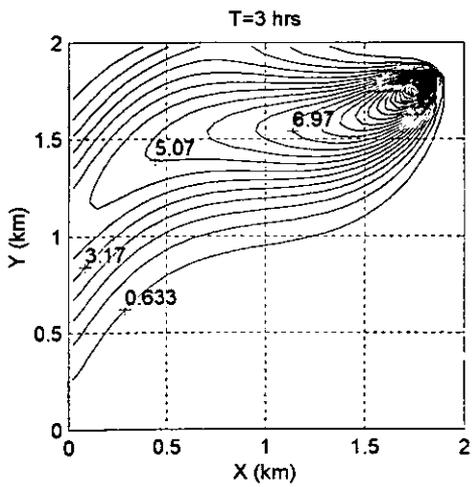
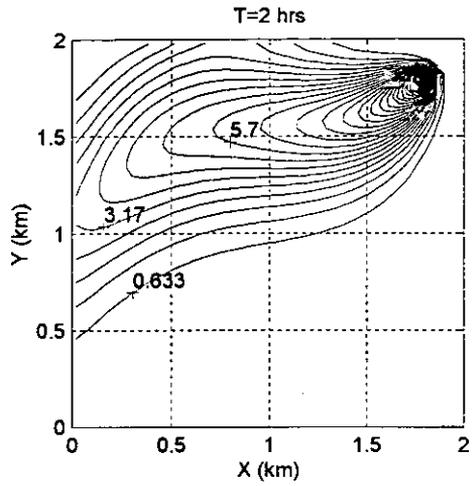
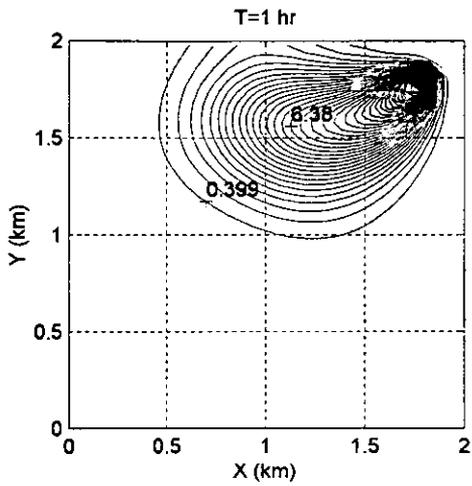


Fig. 3.2.2. Isolfneas de la función adjunta.

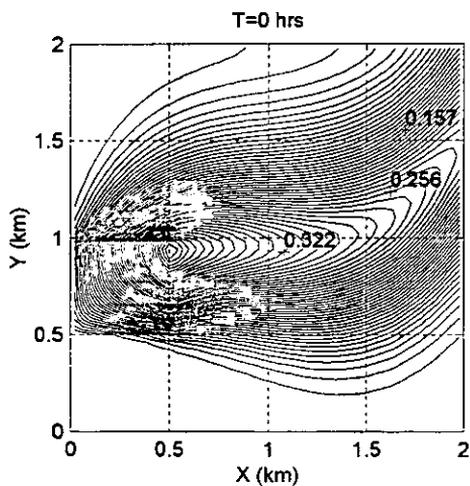
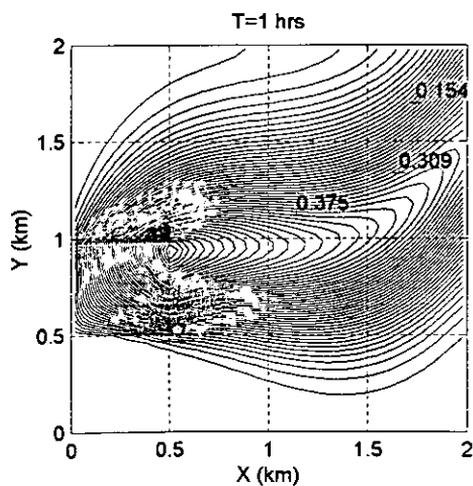
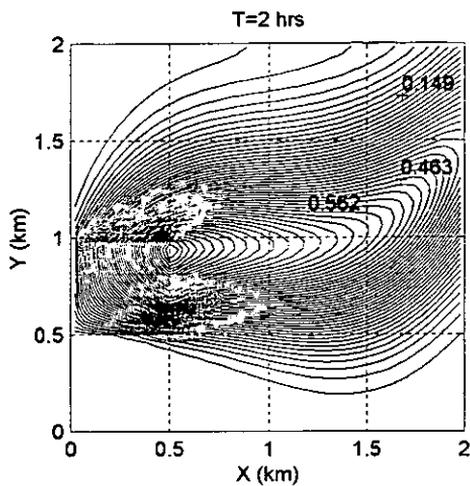
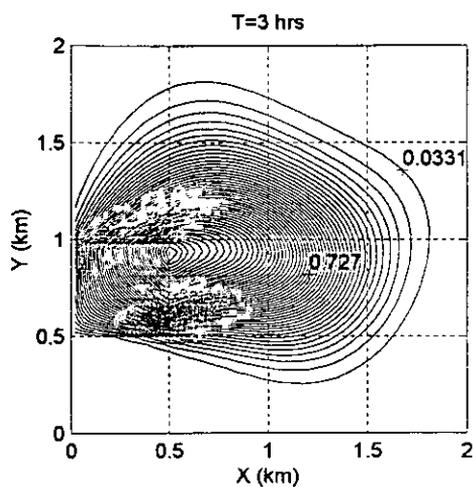
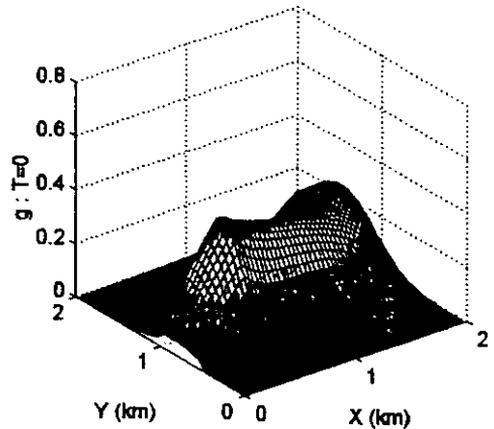
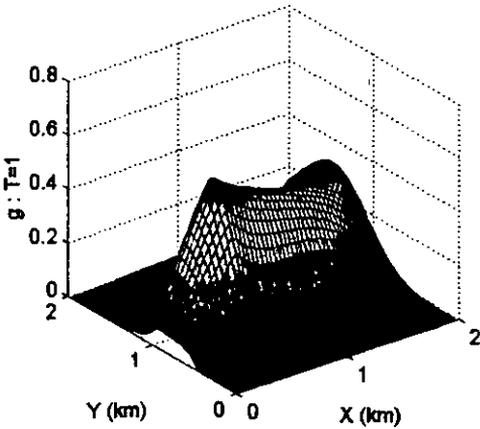
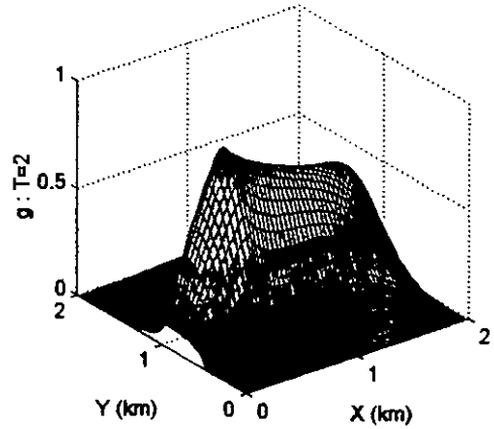
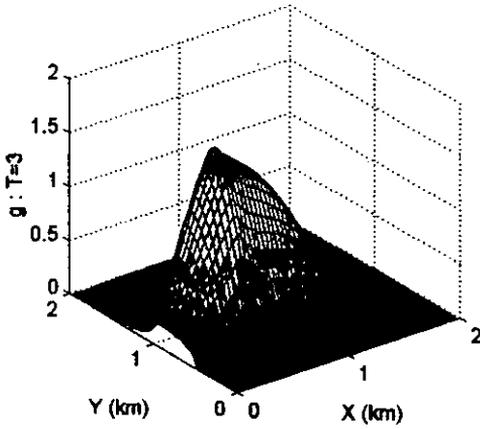


Fig. 3.2.3. Superficies de la función adjunta.



Capítulo 4

Control a corto plazo de emisiones industriales

Debido a la complejidad del fenómeno de la contaminación atmosférica, algunos de los programas de control de emisiones que se han desarrollado en las últimas décadas^[29,33], inician acciones cuando uno o varios de los contaminantes en la región alcanzan niveles desfavorables para la población. Con el fin de generar algunas alternativas, en este capítulo se muestran algunos criterios de control de emisiones industriales a corto plazo correctivos, es decir, estas estrategias de control se construyen cuando el modelo de dispersión (2.1)-(2.5) genera un pronóstico desfavorable, y por lo tanto, se tiene la necesidad inmediata de restringir las tasas de emisión a fin de evitar concentraciones peligrosas de una especie contaminante.

En forma más específica, se resuelve el problema de control definido en la sección 2.4:

Acotar o redefinir en forma adecuada las tasas de emisión $Q_i(t)$ $i = 1..N$, de tal forma que se cumpla:

$$J_{\Omega,\tau}(\phi) \leq J_0, \quad (4.1)$$

en el caso de que el modelo de dispersión (2.1)-(2.5) tenga el pronóstico: $J_{\Omega,\tau}(\phi) > J_0$.

Donde J_0 denota la norma de calidad del aire para la especie contaminante en estudio (Tabla 1.1).

En todas las estrategias que se muestran, destaca la importancia de la solución g del modelo adjunto (3.2)-(3.5), y el principio de dualidad (3.8) para la concentración promedio del contaminante.

4.1. Primera estrategia de control: control en la masa emitida

Por el momento se considera que sólo hay una fuente contaminante ubicada en el sitio r_0 , con una tasa de emisión denotada por $Q(t)$ (más adelante se hace la generalización a N fuentes puntuales). Con esta simplificación, la ecuación (3.8) toma la forma

$$J = J_{\Omega, \tau}(\phi) = \int_0^T g(r_0, t)Q(t) dt + \int_D g(r, 0)\phi^0(r) dr,$$

y se supone que $J_{\Omega, \tau} > J_0$.

La segunda integral, $\int_D g(r, 0)\phi^0(r)dr$, representa la concentración de la especie contaminante en Ω durante el intervalo de tiempo $[T - \tau, T]$, debido sólo a la distribución ϕ^0 del contaminante que había en D al tiempo $t = 0$, es decir, al residuo del contaminante en la atmósfera por la actividad industrial anterior al intervalo de análisis, por ejemplo del día anterior.

El impacto que tiene ϕ^0 en los niveles de contaminación en Ω es imposible de evitar, por lo tanto, para satisfacer (4.1) se debe restringir la tasa Q de tal forma que el impacto de ésta en Ω no supere el valor $J_0 - \int_D g(r, 0)\phi^0(r) dr$, lo cual sólo tiene sentido cuando dicha cantidad es positiva. Con el fin de caracterizar los diferentes casos involucrados en el proceso de control se define el parámetro $\hat{\alpha}$ como:

$$\hat{\alpha} = J_0 - \int_D g(r, 0)\phi^0(r) dr. \quad (4.2)$$

Si $\hat{\alpha} = 0$, entonces la única estrategia de restricción de contaminantes para lograr que

$$J_{\Omega, \tau}(\phi) \leq J_0,$$

es tomar $Q \equiv 0$ en $[0, T]$, lo cual significa el paro de la actividad industrial. Si $\hat{\alpha} < 0$, entonces aún tomando $Q \equiv 0$ en $[0, T]$, se tiene que se sobrepasa la concentración máxima admisible J_0 en la región Ω (no hay solución al problema de control), sin embargo, es importante notar que parar la actividad industrial reduce el riesgo de alcanzar niveles tóxicos del contaminante. El caso más interesante ocurre cuando $\hat{\alpha} > 0$, que corresponde al caso en que el residuo ϕ^0 del contaminante del día anterior es pequeño.

Con la suposición de $\hat{\alpha} > 0$, y usando el producto interior de $L_2(0, T)$, se puede afirmar que el objetivo es hallar $Q \in L_2(0, T)$ tal que

$$\int_0^T g(\mathbf{r}_0, t)Q(t) dt = (g(\mathbf{r}_0), Q) \leq \hat{\alpha}.$$

Existe una infinidad de soluciones a este problema, y cada tasa de emisión Q que satisface la desigualdad define una estrategia de restricción de emisiones contaminantes.

Una tasa de emisión Q tal que $(g(\mathbf{r}_0), Q) < \hat{\alpha}$, podría restringir significativamente la producción de una empresa, por lo cual, es mejor para la industria buscar Q tal que $(g(\mathbf{r}_0), Q) = \hat{\alpha}$. Este último problema también tiene una infinidad de soluciones, y algunas de ellas aun cuando mantienen niveles de contaminación aceptables en Ω , pueden tener fuertes emisiones en \mathbf{r}_0 y dañar con esto una vecindad de este punto. Para evitar esto, se deben hallar aquellas tasas de emisión Q que liberen la menor masa contaminante entre aquellas que cumplan $(g(\mathbf{r}_0), Q) = \hat{\alpha}$. Como más adelante se muestra, este problema tiene solución única y se denota como Q_{\min} .

Se define la funcional $F : L_2(0, T) \rightarrow \Re$ como:

$$F(Q) = \|Q\|^2,$$

donde $\|Q\| = \sqrt{\int_0^T Q^2(t)dt}$, es la norma inducida en $L_2(0, T)$. F mide la masa total del contaminante que es emitida por la fuente puntual ubicada en \mathbf{r}_0 con una tasa $Q(t)$, en el intervalo de tiempo $[0, T]$.

De esta forma, la primera estrategia de control se define a través del siguiente problema de optimización:

$$\begin{aligned} \min F(Q) &= \|Q\|^2, \\ \text{sujeto a : } &(g(\mathbf{r}_0), Q) = \hat{\alpha}. \end{aligned}$$

Este problema de optimización tiene una interpretación geométrica sencilla. La ecuación $(g(\mathbf{r}_0), Q) = \hat{\alpha}$ define un hiperplano en $L_2(0, T)$ con normal $g(\mathbf{r}_0, t)$, y F representa la distancia de cada punto en este hiperplano al origen. Por lo tanto, el problema de optimización consiste en hallar el punto del hiperplano de mínima distancia al origen.

En lo que sigue se muestran varios resultados sobre convexidad, los cuales son necesarios para establecer que este problema tiene solución única, y además, la L_2 -norma de dicha solución define una cota adecuada para las tasas de emisión de las fuentes contaminantes.

Lema 4.1. El conjunto

$$C = \{Q \in L_2(0, T) \mid (g(\mathbf{r}_0), Q) = \hat{\alpha}\},$$

es convexo, y $F|_C$ es una funcional estrictamente convexa.

Demostración. Sean Q_1 y Q_2 elementos distintos en C y $\lambda \in (0, 1)$, $\lambda Q_1 + (1 - \lambda)Q_2 \in L_2(0, T)$ y

$$(g(\mathbf{r}_0), \lambda Q_1 + (1 - \lambda)Q_2) = \lambda(g(\mathbf{r}_0), Q_1) + (1 - \lambda)(g(\mathbf{r}_0), Q_2) = \lambda \hat{\alpha} + (1 - \lambda)\hat{\alpha} = \hat{\alpha},$$

por lo tanto C es convexo.

Por otra parte,

$$(\lambda Q_1 + (1 - \lambda)Q_2)^2 = (Q_2 + \lambda(Q_1 - Q_2))^2 < \lambda Q_1^2 + (1 - \lambda)Q_2^2 \quad \forall t,$$

ya que $\lambda^2 < \lambda$. Integrando en $(0, T)$ se tiene la convexidad estricta de F . \square

Lema 4.2. Para toda funcional F estrictamente convexa, definida sobre un conjunto convexo C contenido en un espacio normado, se tiene que

(i) si existe un mínimo local de F sobre C , entonces éste debe ser un mínimo global sobre C , y

(ii) si existe un mínimo global de F sobre C , entonces éste debe ser único.

Demostración. Para verificar la primera parte del lema, supongamos que $Q^* \in C$ es un mínimo local de F . Esto significa que existe $\varepsilon > 0$ tal que $F(Q^*) \leq F(Q)$, $\forall Q \in C$ tal que $\|Q - Q^*\| < \varepsilon$.

Sea $q \in C$ tal que $\|q - Q^*\| \geq \varepsilon$, y supongamos que $F(q) < F(Q^*)$. Se define el escalar λ_0 como:

$$\lambda_0 = 1 - \frac{\varepsilon}{2\|q - Q^*\|}.$$

Claramente $\lambda_0 < 1$, y ya que $\|q - Q^*\| \geq \varepsilon$ entonces $\frac{\varepsilon}{2\|q - Q^*\|} \leq \frac{1}{2} < 1$, por lo tanto $\lambda_0 > 0$.

Usando la convexidad estricta de F se tiene

$$F(\lambda_0 Q^* + (1 - \lambda_0)q) < \lambda_0 F(Q^*) + (1 - \lambda_0)F(q) < F(Q^*).$$

Por otra parte,

$$\|\lambda_0 Q^* + (1 - \lambda_0)q - Q^*\| = (1 - \lambda_0)\|q - Q^*\| = \frac{\varepsilon}{2} < \varepsilon.$$

Ya que $\lambda_0 Q^* + (1 - \lambda_0)q \in C$ (por convexidad), entonces las últimas dos desigualdades contradicen que Q^* es mínimo local. Por lo tanto, $F(Q^*) \leq F(q)$.

Para verificar la segunda parte del lema, supongamos que Q_1^* y Q_2^* son mínimos globales diferentes. Se tiene que $F(Q_1^*) = F(Q_2^*)$. Además, si $0 < \lambda < 1$ entonces

$$F(\lambda Q_1^* + (1 - \lambda)Q_2^*) < F(Q_1^*).$$

Lo cual contradice que Q_1^* es mínimo global. Por lo tanto $Q_1^* = Q_2^*$.

(Se pueden consultar [1], [5] y [46] para ver resultados sobre convexidad más generales). \square

Por los Lemas 4.1 y 4.2, se tiene que si el problema de optimización antes formulado tiene un mínimo en C , entonces este es global y debe ser único. Ahora se muestra la existencia de dicho mínimo.

Teorema 4.1. Sea

$$Q_{\min} = \hat{\alpha} \frac{g(\mathbf{r}_0, t)}{\|g(\mathbf{r}_0)\|^2},$$

entonces Q_{\min} es el mínimo de F sobre C .

Demostración. Ya que para la tasa de emisión original se tiene $J_{\Omega, \tau} > J_0$, entonces

$$0 < \hat{\alpha} < \int_0^T Q(t)g(\mathbf{r}_0, t) dt \leq \|Q\| \|g(\mathbf{r}_0)\|,$$

por lo cual $\|g(\mathbf{r}_0)\| > 0$, y Q_{\min} está bien definida.

Por otra parte, $Q_{\min} \in L_2(0, T)$ y

$$(g(\mathbf{r}_0), Q_{\min}) = (g(\mathbf{r}_0, t), \hat{\alpha} \frac{g(\mathbf{r}_0, t)}{\|g(\mathbf{r}_0)\|^2}) = \hat{\alpha},$$

por lo cual $Q_{\min} \in C$.

Sea $Q \in C$ arbitrario ($Q \neq Q_{\min}$), definamos $\delta Q = Q - Q_{\min}$. Tenemos que $\forall \lambda \in \mathbb{R}$

$$(Q_{\min} + \lambda \delta Q, g(\mathbf{r}_0)) = \hat{\alpha} \quad y \quad (Q_{\min}, \delta Q) = 0.$$

Definamos :

$$h(\lambda) = F(Q_{\min} + \lambda\delta Q) = \int_0^T (Q_{\min} + \lambda\delta Q)^2 dt.$$

$$h'(\lambda) = 2 \int_0^T (Q_{\min} + \lambda\delta Q)\delta Q dt \quad y \quad h'(0) = \int_0^T Q_{\min}\delta Q dt = 0,$$

por lo tanto, $\lambda = 0$ es un punto crítico de $h(\lambda)$.

$$h''(\lambda) = 2 \int_0^T |\delta Q|^2 dt > 0,$$

por lo cual $\lambda = 0$ es un mínimo local de h . Ya que h es la restricción de F sobre una línea en C , entonces h es estrictamente convexa, y por el Lema 4.2 tenemos que $\lambda = 0$ es un mínimo global único; por lo tanto,

$$h(0) < h(1) \quad \text{ó} \quad F(Q_{\min}) < F(Q). \quad \square$$

Teorema 4.2. Sea $\hat{\alpha} > 0$, y sea $Q(t) \geq 0$ cualquier tasa de emisión en el sitio r_0 tal que

$$\|Q\| \leq \|Q_{\min}\| = \frac{\hat{\alpha}}{\|g(r_0)\|},$$

entonces se cumple que la concentración promedio del contaminante, en una zona de importancia ecológica Ω , no rebasa la concentración máxima admisible J_0 .

Demostración. Aplicando la desigualdad de Schwarz^[30] se tiene que

$$(Q, g(r_0)) \leq \|Q\| \|g(r_0)\| \leq \frac{\hat{\alpha}}{\|g(r_0)\|} \|g(r_0)\| = \hat{\alpha},$$

usando (4.2) concluimos que

$$J_{\Omega, \tau}(\phi) = \int_0^T g(r_0, t)Q(t)dt + \int_D g(r, 0)\phi^0(r)dr \leq J_0. \quad \square$$

Es importante notar que la última proposición define la cota que debe cumplir la norma de la tasa de emisión Q , y por lo tanto, no se restringe la forma de Q en el intervalo $(0, T)$.

Generalización

Para extender estas ideas al caso de varias fuentes puntuales, primero hay que observar que se deben eliminar del problema de control aquellas fuentes tales que $\int_0^T g(\mathbf{r}_k, t) Q_k(t) dt = 0$, ya que en este caso dichas fuentes no contribuyen a la contaminación en Ω , y por lo tanto no hay que restringir su operación.

Sean \mathbf{r}_i , para $i = 1..N$, los sitios de las fuentes puntuales de emisión del contaminante que si impactan la región Ω , y supongamos que $J_{\Omega, \tau} > J_0$. En este caso se deben elegir las tasas $Q_i(t)$ $i = 1..N$, de tal forma que se cumpla

$$J_{\Omega, \tau}(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\mathbf{r}_i, t) Q_i(t) dt + \int_D g(\mathbf{r}, 0) \phi^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \leq J_0.$$

Como antes, se supone que el parámetro $\hat{\alpha}$ definido en (4.2) es positivo.

Sean $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_N$, constantes positivas (pesos), definidas por:

$$\gamma_i = \frac{m_i}{\sum_{j=1}^N m_j}, \quad i = 1..N, \quad (4.3)$$

donde $m_j = F(Q_j)$, es una medida de la masa total que emite la fuente j -ésima antes de restringirla.

Estos pesos satisfacen que

$$\gamma_1 + \gamma_2 + \dots + \gamma_N = 1, \quad (4.4)$$

y cada constante γ_i representa la fracción, que corresponde a la industria i -ésima, de la masa total del contaminante que puede ser emitido cuando las empresas trabajan sin restringir su capacidad. Dicha constante está en función del tamaño de la empresa. Por ejemplo, si sólo hay dos empresas en la región de estudio, y la ubicada en \mathbf{r}_2 , trabajando sin restricción, puede emitir dos veces más contaminantes que la ubicada en \mathbf{r}_1 , que trabaja también sin límites, entonces se determinan los pesos como: $\gamma_1 = \frac{1}{3}$ y $\gamma_2 = \frac{2}{3}$.

Con estos pesos definidos, se consideran las nuevas tasas de emisión en la forma:

$$Q_i^* = \gamma_i \hat{\alpha} \frac{g(\mathbf{r}_i, t)}{\|g(\mathbf{r}_i)\|^2}, \quad i = 1..N. \quad (4.5)$$

En este caso se obtiene

$$\sum_{i=1}^N (Q_i^*, g(\mathbf{r}_i)) = \sum_{i=1}^N \gamma_i \hat{\alpha} = \hat{\alpha},$$

y aplicando (4.2) se concluye que $J_{\Omega, \tau}(\phi) \leq J_0$. Es importante observar que en todos los casos $\|g(\mathbf{r}_i)\| > 0$, ya que $\int_0^T g(\mathbf{r}_i, t)Q_i(t)dt > 0$, es decir, las Q_i^* están bien definidas.

Para generalizar la restricción basada en la acotación de la norma (Teorema 4.2), se observa que para cualquier tasa de emisión Q_i que satisface $\|Q_i\| \leq \|Q_i^*\|$, se tiene

$$(Q_i, g(\mathbf{r}_i)) \leq \|Q_i^*\| \|g(\mathbf{r}_i)\| \leq \frac{\gamma_i \cdot \hat{\alpha}}{\|g(\mathbf{r}_i)\|} \|g(\mathbf{r}_i)\| = \gamma_i \cdot \hat{\alpha},$$

y sumando sobre esta desigualdad se obtiene

$$\sum_{i=1}^N (Q_i, g(\mathbf{r}_i)) \leq \sum_{i=1}^N \gamma_i \cdot \hat{\alpha} = \hat{\alpha},$$

es decir, $J_{\Omega, \tau}(\phi) \leq J_0$.

4.2. Segunda estrategia de control: control en la estructura temporal

La estrategia de control formulada a través de las ecuaciones (4.5) es correcta, sin embargo, puede tener la desventaja de forzar el paro de las fuentes industriales en algún periodo de tiempo, ya que de acuerdo a (4.5), las tasas de emisión se definen proporcionalmente a la función adjunta g , y ésta puede ser cero en algún intervalo. Un ejemplo inmediato de este comportamiento es la solución adjunta del Ejemplo 3.2 (Fig. 3.2.2), la cual es cero en r_1 , al menos, durante el intervalo de $t = 4$ a $t = 3$, y por lo tanto Q_1^* se anula en el mismo periodo.

En esta sección se formula una estrategia de control de emisiones contaminantes, que a diferencia de la planteada en la sección anterior, lo que restringe es la estructura de las tasas Q_i en el intervalo $(0, T)$, y además, no forza al paro de la actividad industrial cuando la adjunta se anula.

Se supone, como en la sección anterior, que sólo hay una fuente puntual que emite una especie contaminante en el sitio \mathbf{r}_0 , y que el parámetro $\hat{\alpha}$ definido por (4.2) es positivo. El objetivo como antes es hallar $Q \in L_2(0, T)$ tal que

$$\int_0^T g(\mathbf{r}_0, t)Q(t)dt \leq \hat{\alpha}.$$

La idea para lograr que se cumpla la desigualdad anterior es permitir que $Q(t)$ tome valores grandes cuando $g(r_0, t)$ tiene valores pequeños, y que $Q(t)$ tome valores pequeños cuando $g(r_0, t)$ tiene valores grandes. La ventaja en este criterio es que en un determinado intervalo de tiempo se permitiría la operación al máximo de la fuente ubicada en r_0 (por ejemplo si $g(r_0, t) = 0$). Por tal motivo, se define el parámetro $\delta > 0$ como la tasa máxima de emisión con la que puede operar la industria ubicada en r_0 .

Se considera la función auxiliar G como:

$$G(t) = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\hat{\alpha}}{|I| \cdot g(r_0, t)}, & \text{si } t \in I \\ \delta, & \text{si } t \in [0, T] - I \end{array} \right\},$$

donde el subconjunto I se define por:

$$I = \{t \in [0, T] \mid g(r_0, t) > 0\},$$

y $|I|$ denota su longitud. Se debe notar que, si $g(r_0, t)$ es una función continua, entonces I se puede expresar como la unión (numerable) de intervalos abiertos disjuntos contenidos en $[0, T]$, ya que $I = g_0^{-1}(0, +\infty)$ es un conjunto abierto.

Con estas definiciones se puede enunciar el siguiente teorema de restricción suficiente.

Teorema 4.3. Sea $\hat{\alpha} > 0$, y sea $Q(t) \geq 0$ cualquier tasa de emisión en el sitio r_0 tal que

$$Q(t) \leq \min \{\delta, G(t)\} \quad \forall t \in [0, T],$$

entonces se cumple que la concentración promedio del contaminante, en una zona de importancia ecológica Ω , no rebasa la concentración máxima admisible J_0 .

Demostración.

$$\int_0^T g(r_0, t) Q(t) dt = \int_I g(r_0, t) Q(t) dt \leq \int_I g(r_0, t) \frac{\hat{\alpha}}{|I| \cdot g(r_0, t)} dt \leq \frac{\hat{\alpha}}{|I|} \int_I dt \leq \hat{\alpha},$$

si se considera (4.2) se concluye que

$$J_{\Omega, \tau}(\phi) = \int_0^T g(r_0, t) Q(t) dt + \int_D g(r, 0) \phi^0(r) dr \leq J_0. \quad \square$$

Es importante notar que la elección: $Q^*(t) = \min \{\delta, G(t)\}$ es la menos restrictiva, en este caso, para la actividad industrial.

Generalización

Para extender esta estrategia al caso de varias fuentes contaminantes, nuevamente se deben eliminar del problema de control aquellas fuentes tales que $\int_0^T g(\mathbf{r}_k, t)Q_k(t)dt = 0$, ya que en este caso dichas industrias no contribuyen a la contaminación en Ω , y por lo tanto no hay porque restringir su operación.

Sean \mathbf{r}_i , para $i = 1..N$, los sitios de las fuentes puntuales de emisión del contaminante que si impactan la región Ω , y supongamos que $J_{\Omega, \tau} > J_0$. Hay que notar que, seleccionadas las fuentes de esta forma, ninguna de las funciones $g(\mathbf{r}_i, t)$ es idénticamente cero en el intervalo $[0, T]$. Se concluye entonces que los respectivos subconjuntos I_i tienen longitud mayor que cero.

Como antes, se definen para $i = 1..N$ las funciones auxiliares G_i como :

$$G_i(t) = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\hat{\alpha}}{|\mathcal{I}_i| \cdot g(\mathbf{r}_i, t)}, & \text{si } t \in I_i \\ \delta_i, & \text{si } t \in [0, T] - I_i \end{array} \right\},$$

donde δ_i es la tasa de emisión máxima correspondiente a la industria i -ésima.

El Teorema 4.3 se generaliza acotando las nuevas tasas de emisión en la forma:

$$Q_i^*(t) \leq \gamma_i \cdot \min \{ \delta_i, G_i(t) \} \quad \forall t \text{ y } \forall i, \quad (4.6)$$

donde los pesos γ_i se definen por (4.3); y la igualdad define las tasas menos restrictivas.

Con esto se tiene que

$$\int_0^T g(\mathbf{r}_i, t)Q_i^*(t) dt \leq \hat{\alpha} \cdot \gamma_i.$$

Sumando sobre i y aplicando (4.4) se establece

$$\sum_{i=1}^N \int_0^T g(\mathbf{r}_i, t)Q_i^*(t) dt \leq \sum_{i=1}^N \hat{\alpha} \cdot \gamma_i = \hat{\alpha},$$

es decir, $J_{\Omega, \tau}(\phi) \leq J_0$.

La ecuación (4.4) ha sido necesaria para establecer las generalizaciones en las dos estrategias de control, sin embargo, es importante notar que (4.3) no es la única forma de definir los pesos γ_i con esta propiedad. Una posible alternativa es definir $\gamma_i = \frac{\delta_i}{\sum_{j=1}^N \delta_j}$, de esta forma también se cumple (4.4).

En este caso γ_i representa el poder de la fuente i -ésima con respecto a las otras fuentes contaminantes.

4.3. Tercera estrategia de control: control óptimo

Las tasas de emisión definidas por (4.5) y (4.6) son suficientes para satisfacer la relación $J_{\Omega, \tau} \leq J_0$, sin embargo, la estructura temporal de éstas no necesariamente coincide con la estructura de las tasas de emisión originales. Esto puede representar una dificultad para las industrias que no puedan acoplar su ritmo de trabajo a las nuevas tasas que definan las estrategias de control.

Esta dificultad se puede resolver al buscar las tasas de emisión más adecuadas en la forma:

$$Q_i^*(t) = \beta_i Q_i(t), \quad i = 1..N,$$

donde las β_i son constantes positivas de amortiguamiento, y las Q_i representan las tasas de emisión con que trabajan las fuentes industriales antes del control (en general $Q_i(t) \leq \delta_i$, $i = 1..N$). De esta forma, cada Q_i^* tiene una estructura temporal similar a la tasa original, y por lo tanto, la fuente industrial puede adaptarse más fácilmente a este control.

Las constantes de amortiguamiento β_i se buscan de tal forma que cada Q_i^* esté lo más cerca posible a Q_i (control óptimo), es decir, se quiere minimizar los términos $\int_0^T (Q_i^*(t) - Q_i(t))^2 dt$; y esto a su vez de tal manera que se cumpla la norma de la calidad del aire respectiva. Por lo tanto, se establece el siguiente problema de control óptimo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\beta_i} H = \sum_{i=1}^N \|Q_i\|_{L_2(0,T)}^2 \cdot (\beta_i - 1)^2, \\ \text{sujeto a : } \left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^N a_i \beta_i = \hat{\alpha}, \\ \beta_1 \geq 0, \beta_2 \geq 0, \dots, \beta_N \geq 0. \end{array} \right. \end{array} \right\},$$

donde $a_i = \int_0^T g(r_i, t) Q_i(t) dt > 0$ para $i = 1..N$; y como antes, se supone que con las tasas originales Q_i se tiene un pronóstico desfavorable $J_{\Omega, \tau} > J_0$, o en forma equivalente $\sum_{i=1}^N a_i > \hat{\alpha}$, con $\hat{\alpha} > 0$. $a_i > 0$ significa que sólo se consideran para el control aquellas fuentes que impactan a la región Ω .

El problema anterior se puede escribir en forma equivalente como:

$$(1) \quad \left\{ \begin{array}{l} \min_{x_i} H(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N (x_i - x_i^0)^2, \\ \text{sujeto a : } (2) \quad \left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^N b_i x_i = \hat{\alpha}, \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \dots, x_N \geq 0. \end{array} \right. \end{array} \right\},$$

donde $x_i = \|Q_i\|_{L_2(0,T)} \cdot \beta_i$, $x_i^0 = \|Q_i\|_{L_2(0,T)} > 0$, y $b_i = \frac{a_i}{\|Q_i\|_{L_2(0,T)}} > 0$;

además: $\sum_{i=1}^N b_i x_i^0 > \hat{\alpha}$.

Caracterización de la solución del problema (1)

Con el fin de establecer la existencia y la unicidad de la solución del problema (1) se destacan las siguientes propiedades.

P.1. El conjunto C de factibilidad definido por las condiciones (2), es un conjunto convexo y compacto.

La convexidad se prueba como en el Lema 4.1; y para la compacidad sólo hay que verificar que es cerrado y acotado, ya que es un subconjunto de \mathbb{R}^N .

C es acotado porque al tomar $b_m = \min \{b_1, b_2, \dots, b_N\} > 0$, se tiene

$$0 \leq x_j \leq x_1 + x_2 + \dots + x_N \leq \frac{\hat{\alpha}}{b_m}, \quad j = 1..N.$$

Por lo tanto,

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^N x_j^2} \leq \frac{\hat{\alpha}}{b_m} \sqrt{N}.$$

C es cerrado porque para cualquier sucesión en este conjunto que sea convergente, se obtiene

$$0 = \lim_{k \rightarrow \infty} (\mathbf{x}^k \cdot \mathbf{b} - \hat{\alpha}) = \mathbf{y} \cdot \mathbf{b} - \hat{\alpha}.$$

Además: $x_j^k \rightarrow y_j \quad j = 1..N$, por lo que $y_j \geq 0 \quad j = 1..N$. Esto significa que el límite $\mathbf{y} \in C$.

P.2. La función objetivo H en (1) es estrictamente convexa en el conjunto C .

La demostración es similar a la del Lema 4.2.

P.3. $H \in C^\infty(\mathbb{R}^N)$, en particular es continua en C .

Esto es claro ya que las derivadas parciales de cualquier orden son continuas. En particular, las de orden tres o mayor son cero.

Teorema 4.4. El problema (1) tiene una solución, y ésta es única.

Demostración. Por P.1 y P.3 se sabe que H es continua en un conjunto compacto C , y por lo tanto, H debe tener un mínimo global \mathbf{x}^* en este conjunto (Teorema de Weierstrass^[18]). Por otra parte, P.2 indica que H es estrictamente convexa en C , y usando el Lema 4.2 se concluye que \mathbf{x}^* es único. \square

Los siguientes teoremas nos indican que la solución del problema (1) tiene un carácter más general que el indicado por las restricciones (2).

Teorema 4.5. Se considera el problema de control óptimo:

$$(1.a) \quad \left\{ \begin{array}{l} \min_{x_i} H(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N (x_i - x_i^0)^2, \\ \text{sujeto a : (2.a)} \quad \left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^N b_i x_i \leq \hat{\alpha}, \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \dots, x_N \geq 0. \end{array} \right\} \end{array} \right\}.$$

La solución \mathbf{x}^* del problema (1.a) satisface: $\sum_{i=1}^N b_i x_i^* = \hat{\alpha}$.

Demostración. Ya que H y el conjunto de factibilidad definido por (2.a) también satisfacen las propiedades P.1, P.2 y P.3, entonces la solución \mathbf{x}^* de (2.a) existe y es única.

Si $v = \mathbf{x}^* \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^N b_i x_i^* < \hat{\alpha}$, entonces se define:

$$\lambda = \frac{\hat{\alpha} - v}{u - v},$$

donde $u = \mathbf{x}^0 \cdot \mathbf{b} = \sum_{i=1}^N b_i x_i^0 > \hat{\alpha}$. Claramente $0 < \lambda < 1$, por lo cual $\lambda \mathbf{x}^0 + (1 - \lambda) \mathbf{x}^*$ está en el espacio de factibilidad definido por (2.a). Además,

$$H(\lambda \mathbf{x}^0 + (1 - \lambda) \mathbf{x}^*) = (1 - \lambda)^2 H(\mathbf{x}^*) < H(\mathbf{x}^*),$$

lo cual contradice que \mathbf{x}^* es el mínimo. Por lo tanto $\sum_{i=1}^N b_i x_i^* = \hat{\alpha}$. \square

Por la convexidad estricta de H , se tiene que el mínimo calculado en el problema (1) es exactamente el mínimo calculado en el problema (1.a). La ventaja de este resultado radica en que es más fácil minimizar en el conjunto de factibilidad (2) que en (2.a), y el resultado sigue siendo general.

Teorema 4.6. Para el mínimo \mathbf{x}^* calculado en el problema (1) se satisface que $x_i^* \leq x_i^0 \quad \forall i = 1 \dots N$. Por lo tanto, las constantes de amortiguamiento óptimas satisfacen que $\beta_i^* \leq 1 \quad \forall i = 1 \dots N$.

Demostración. Sea \mathbf{x}^* el mínimo en (1), sin pérdida de generalidad, supongamos que $x_1^* > x_1^0$. Se define entonces \mathbf{x}^{**} en la forma: $x_1^{**} = x_1^0 > 0$, y $x_j^{**} = x_j^* \geq 0$ para $j = 2 \dots N$.

$$\mathbf{x}^{**} \cdot \mathbf{b} < \mathbf{x}^* \cdot \mathbf{b} = \hat{\alpha},$$

por lo cual \mathbf{x}^{**} está en el espacio factible definido por (2.a). Por otra parte,

$$H(\mathbf{x}^{**}) = \sum_{i=2}^N (x_i^* - x_i^0)^2 < H(\mathbf{x}^*),$$

lo cual contradice que \mathbf{x}^* es mínimo del problema (1.a). Por lo tanto, $x_i^* \leq x_i^0 \forall i = 1..N$. \square

De este último resultado se concluye que las tasas de emisión óptimas definidas por $Q_i^* = \beta_i^* Q_i$ para $i = 1..N$, satisfacen $\forall i$ que $Q_i^*(t) \leq Q_i(t) \forall t$. Esto significa que *todas* las fuentes industriales deben disminuir su ritmo de trabajo a fin de cumplir la norma de calidad del aire.

Solución del problema (1)

El siguiente teorema es necesario para establecer un algoritmo que calcule el mínimo \mathbf{x}^* del problema (1).

Teorema 4.7. Sea $\mathbf{x}^* \in C$. Si para toda $\mathbf{x} \in C$ ($\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$), se satisface que

$$-\nabla H(\mathbf{x}^*) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) \leq 0, \quad (4.7)$$

entonces \mathbf{x}^* es el mínimo de H en el conjunto de factibilidad C .

Demostración. Por el Teorema de Taylor^[18] es posible escribir

$$H(\mathbf{x}) = H(\mathbf{x}^*) + \nabla H(\mathbf{x}^*) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) + \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_2^2 \quad \forall \mathbf{x} \in C,$$

ya que todas las derivadas parciales de orden tres o mayor se anulan. De hecho, la igualdad es verdadera en todo el espacio \mathfrak{R}^N .

Si $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$ entonces

$$-\nabla H(\mathbf{x}^*) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) > H(\mathbf{x}^*) - H(\mathbf{x}).$$

Por lo tanto, si se satisface (4.7) entonces $H(\mathbf{x}^*) < H(\mathbf{x})$ para toda $\mathbf{x} \in C$ ($\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$). \square

La demostración del Teorema 4.7 es válida en el caso específico del problema (1), sin embargo, el resultado es verdadero para cualquier función H convexa^[18].

Para determinar en forma explícita el mínimo del problema (1), se debe considerar la proyección ortogonal, derivada de las condiciones necesarias en el proceso de minimización con multiplicadores de Lagrange^[18]:

$$x_j^* = x_j^0 - \frac{\lambda}{2} b_j, \quad j = 1..N, \quad (4.8)$$

donde

$$\frac{\lambda}{2} = \frac{\sum_{i=1}^N b_i x_i^0 - \hat{\alpha}}{\sum_{i=1}^N b_i^2}. \quad (4.9)$$

Con esta elección se satisface que $\sum_{j=1}^N b_j x_j^* = \hat{\alpha}$.

Algoritmo de proyecciones ortogonales sucesivas

Paso I. Si $x_j^* \geq 0$ para $j = 1..N$, entonces $\mathbf{x}^* \in C$ y

$$-\nabla H(\mathbf{x}^*) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) = \lambda \sum_{j=1}^N b_j x_j - \lambda \sum_{j=1}^N b_j x_j^* = \lambda \hat{\alpha} - \lambda \hat{\alpha} = 0,$$

para toda $\mathbf{x} \in C$ ($\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$). Aplicando el Teorema 4.7 se concluye que \mathbf{x}^* es el mínimo.

Paso II. Si alguna componente de \mathbf{x}^* es negativa, entonces se debe redefinir la proyección. Sin pérdida de generalidad, supongamos que $x_j^* \leq 0$ para $j = l+1 \dots N$ (no todas las componentes pueden ser negativas o cero ya que $\hat{\alpha} > 0$). Se definen $x_j^{**} = 0$ para $j = l+1 \dots N$, y las restantes variables se toman de la nueva proyección con H y C restringidos, es decir,

$$x_j^{**} = x_j^0 - \frac{\eta}{2} b_j, \quad j = 1..l, \quad (4.10)$$

y

$$\frac{\eta}{2} = \frac{\sum_{i=1}^l b_i x_i^0 - \hat{\alpha}}{\sum_{i=1}^l b_i^2}, \quad (4.11)$$

de esta forma se satisface que $\sum_{j=1}^N b_j x_j^{**} = \hat{\alpha}$.

Si $x_j^{**} \geq 0$ para $j = 1..l$, entonces $\mathbf{x}^{**} \in C$ y

$$-\nabla H(\mathbf{x}^{**}) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}^{**}) = 2 \sum_{i=l+1}^N x_i \left(x_i^0 - \frac{\eta}{2} b_i \right), \quad \mathbf{x} \in C, \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{x}^{**}.$$

Después de observar que $\sum_{i=1}^l b_i x_i^* > \hat{\alpha}$, se deduce usando (4.8) la siguiente relación:

$$-\frac{\eta}{2} < -\frac{\lambda}{2}.$$

Con esta desigualdad y (4.8) se concluye que

$$-\nabla H(\mathbf{x}^{**}) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}^{**}) \leq 2 \sum_{i=l+1}^N x_i x_i^* \leq 0,$$

para toda $\mathbf{x} \in C$ ($\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$). Aplicando el Teorema 4.7 se concluye que \mathbf{x}^{**} es el mínimo.

Este algoritmo que calcula proyecciones ortogonales en forma sucesiva es finito, es decir, a lo más se deben realizar N proyecciones para calcular exactamente el mínimo buscado (la última proyección siempre da una variable positiva ya que $\hat{\alpha} > 0$). El siguiente teorema estima el número de operaciones de este proceso, y como se muestra, es computacionalmente económico.

Teorema 4.8. El número de operaciones involucradas en el proceso de proyecciones ortogonales sucesivas, que determinan el mínimo en el problema (1), es a lo más $3(N^2 + N)$.

Demostración. Si se cuentan las operaciones en (4.10) y (4.11), entonces se obtiene que se realizan $3l - 1$ sumas/restas y $3l + 1$ multiplicaciones/divisiones en cada proyección. Sumando para $l = 1 \dots N$, se obtienen $\frac{3}{2}N(N + 1) - N$ sumas /restas y $\frac{3}{2}N(N + 1) + N$ multiplicaciones/divisiones, durante todo el proceso de búsqueda. Sumando estas estimaciones se concluye que hay un total de $3(N^2 + N)$ operaciones. \square

Este resultado determina que el algoritmo de búsqueda es un proceso polinomial respecto del número de fuentes puntuales, lo cual indica que el problema (1) es fácilmente resoluble con la tecnología actual. Por ejemplo, si $N = 100$ fábricas, entonces, usando una sencilla PC que realiza 10,000 operaciones por segundo, se tiene un tiempo de cómputo no mayor a 3.03 *seg* para determinar las tasas óptimas; y en el caso $N = 1000$ un tiempo no mayor a 5 *min*.

Establecer una conclusión como el Teorema 4.8 era indispensable en el control de corto plazo, ya que en esta situación resulta vital proponer controles a la brevedad.

Finalmente, es importante notar que con esta estrategia de control se garantiza que todas las tasas de emisión óptimas son constantes cuando las

tasas originales también lo son, por lo cual, esta estrategia generaliza los resultados contenidos en [27].

4.4. Control por combinaciones lineales convexas

El parámetro $\hat{\alpha}$ dado por (4.2) es un indicador de la existencia de la solución del problema de control definido en la sección 2.4, es decir, caracteriza el conjunto solución de dicho problema en la siguiente forma:

- a) Si $\hat{\alpha} < 0$ entonces no hay solución al problema de control.
- b) Si $\hat{\alpha} = 0$ entonces hay sólo una solución al problema de control.
- c) Si $\hat{\alpha} > 0$ entonces existe una infinidad de soluciones al problema de control.

El último caso es claro cuando se consideran todas las posibles tasas de emisión que cumplen las condiciones del Teorema 4.2 o su generalización, sin embargo, ésta no es la única forma de generar una infinidad de soluciones, ya que es posible mezclar diferentes estrategias de control por medio de combinaciones lineales convexas. Para esto, se deben elegir constantes no negativas $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_M$ tales que

$$\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_M = 1,$$

donde M es el número de estrategias de control previamente definidas. Con las ideas desarrolladas en este capítulo $M = 3$, sin embargo, pueden existir otros criterios para redefinir las tasas de emisión.

Sea $Q_{i,k}^*$ la tasa de emisión correspondiente a la i -ésima fuente contaminante que es definida por la k -ésima estrategia de control; se consideran las nuevas tasa de emisión como

$$q_i^*(t) = \sum_{k=1}^M \xi_k Q_{i,k}^*(t), \quad i = 1 \dots M.$$

Estas tasas también satisfacen la norma de calidad del aire, ya que

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \int_0^T q_i^*(t) g(r_i, t) dt &= \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^M \xi_k \int_0^T Q_{i,k}^* g(r_i, t) dt = \\ &= \sum_{k=1}^M \xi_k \left(\sum_{i=1}^N \int_0^T Q_{i,k}^* g(r_i, t) dt \right), \end{aligned}$$

y ya que cada término en el paréntesis es menor que $\hat{\alpha}$ se tiene

$$\sum_{i=1}^N \int_0^T q_i^*(t)g(r_i, t) dt \leq \hat{\alpha} \sum_{k=1}^M \xi_k \leq \hat{\alpha}.$$

Finalmente, al considerar (4.2) se obtiene que $J_{\Omega, \tau} \leq J_0$.

La estrategia de control definida por q_i^* ($i = 1 \dots N$) no sólo es matemáticamente correcta, sino que representa una opción para hacer más adecuadas las M -estrategias a las necesidades de las empresas contaminantes, ya que exhibe una gran variedad de posibilidades que dependen de como se elijan las constantes ξ_k ($k = 1 \dots M$). Sin embargo, no se debe olvidar que la estrategia de control óptimo puede seguir teniendo varias ventajas sobre todos estos controles.

4.5. Ejemplos numéricos de control

En esta sección se construyen numéricamente las tasas de emisión que definen las diferentes estrategias de control expuestas. Se analizan tres ejemplos, en los cuales, los modelos de dispersión y su adjunto se resuelven por el esquema de aproximación numérica que se expone en el Capítulo 5. En todos los ejemplos se considera que el modelo (2.1)-(2.5) tiene un pronóstico de corto plazo desfavorable, y por lo tanto, es necesario el control de las emisiones.

Ejemplo 4.1. Se considera una fuente puntual que emite partículas de plomo exactamente como en el Ejemplo 3.1. En este caso se tiene un pronóstico en la concentración promedio de $2.11 \frac{\mu g}{m^3}$ para la región Ω , en cuatro horas de operación de la fuente. Esto es insatisfactorio ya que la norma sanitaria respectiva es de $1.5 \frac{\mu g}{m^3}$, por lo tanto, se aplicaron las tres estrategias de control, y se construyeron dos más por combinaciones lineales convexas. Los resultados de operación con estas tasas se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 4.1

Tasa de emisión	$J_{\Omega, \tau} \left(\frac{\mu g}{m^3} \right)$
Q	2.11
Q_1^*	1.50
Q_2^*	1.18
Q_3^*	1.50
$Q_4^* = 0.3 \cdot Q_1^* + 0.7 \cdot Q_3^*$	1.50
$Q_5^* = 0.5 \cdot Q_2^* + 0.5 \cdot Q_3^*$	1.34

$Q = 3.8 \frac{kg}{hr}$ es la tasa de emisión original de la fuente puntual, para la cual se consideró una tasa máxima $\delta = Q$; Q_i^* ($i = 1, 2, 3$) denota la tasa redefinida con la i -ésima estrategia de control, y las tasas definidas por combinaciones convexas son Q_4^* y Q_5^* .

Los cinco controles definidos satisfacen la norma sanitaria y cada uno representa una alternativa para la fuente industrial, sin embargo, las tasas Q_3^* (control óptimo) y, Q_4^* y Q_5^* (control convexo), son las que presentan las mejores alternativas de operación (para este ejemplo), ya que significan cambios menos drásticos para la fuente. La tasa de emisión Q_2^* implica iniciar las actividades 60 % abajo de la tasa Q , pero permite que la fuente puntual trabaje un 47 % del tiempo con la tasa original, lo cual también podría ser atractivo. Finalmente, la tasa Q_1^* es la más drástica de todas, ya que implica un paro de actividades durante 25 % del tiempo. En la figura 4.1.1 se presentan todas las tasas descritas.

Es importante notar que la tasa de emisión óptima Q_3^* es estacionaria como la tasa Q , y representa un 71 % de la tasa de operación original. Esto hace de Q_3^* una alternativa simple para la fuente industrial.

Ejemplo 4.2. En el Ejemplo 3.2 se considera, durante cuatro horas, la operación de una fuente puntual que emite partículas de plomo. En este tiempo la concentración promedio en Ω es de $0.90 \frac{\mu g}{m^3}$, lo cual es satisfactorio, sin embargo, el promedio durante las últimas dos horas ($1.60 \frac{\mu g}{m^3}$) indica que el contaminante se acumula rápidamente. Si la fuente opera seis horas con la misma tasa $Q = 4.0 \frac{kg}{hr}$, entonces el promedio en las últimas cuatro es de $1.62 \frac{\mu g}{m^3}$, lo cual implica la necesidad del control en este intervalo de tiempo ($\tau = 4$). Se aplicaron las tres estrategias para construir Q_1^* , Q_2^* y Q_3^* , y con éstas, dos controles convexas Q_4^* y Q_5^* . Los resultados de operación con estas tasas están contenidos en la siguiente tabla.

Tabla 4.2

Tasa de emisión	$J_{\Omega, \tau} \left(\frac{\mu g}{m^3} \right)$
Q	1.62
Q_1^*	1.50
Q_2^*	1.31
Q_3^*	1.50
$Q_4^* = 0.3 \cdot Q_1^* + 0.7 \cdot Q_3^*$	1.50
$Q_5^* = 0.5 \cdot Q_2^* + 0.5 \cdot Q_3^*$	1.42

Aun cuando las cinco tasas satisfacen el problema de control, es claro que Q_3^* y Q_5^* son las más adecuadas para la fuente puntual, ya que están más próximas a la tasa original Q (fig. 4.2.1). También la tasa de emisión Q_2^* puede ser atractiva, porque permite trabajar a la fuente con la tasa máxima $\delta = 4.5 \frac{kg}{hr}$ durante dos horas. Las otras dos tasas implican variaciones más drásticas e incluso el paro de actividades, por lo que son poco viables. En la figura 4.2.1 se muestran las tasas antes descritas.

Se observa que la tasa de emisión óptima Q_3^* es estacionaria como la tasa Q , y representa un 92 % de la tasa de operación original. Esto hace de Q_3^* una alternativa simple para la fuente industrial.

Ejemplo 4.3. En este ejemplo se considera que en el dominio de frontera abierta $D = (0, 3 \text{ km}) \times (0, 3 \text{ km})$, se ubican dos fuentes puntuales que emiten bióxido de azufre (SO_2) con tasas no-estacionarias Q_1 y Q_2 ($\frac{kg}{hr}$).

$$Q_1(t) = \left\{ \begin{array}{ll} 10000 \cdot t & 0 \leq t < 0.5, \\ 5000 & 0.5 \leq t \leq 1, \\ 5000 - 5000 \cdot (t - 7) & 7 < t \leq 8. \end{array} \right\},$$

$$Q_2(t) = \left\{ \begin{array}{ll} 5000 \cdot t & 0 \leq t < 0.5, \\ 2500 & 0.5 \leq t \leq 1, \\ 2500 + 2000 \cdot (t - 1) & 1 < t < 1.5, \\ 3500 & 1.5 \leq t \leq 7.5, \\ 3500 - 7000 \cdot (t - 7.5) & 7.5 < t \leq 8. \end{array} \right\},$$

Las coordenadas de los sitios de emisión son $r_1 = (1.5, 0.2)$ y $r_2 = (0.6, 2.0)$, y se considera que al inicio de la operación de las fuentes hay un residuo ϕ^0 en la atmósfera de este contaminante,

$$\phi^0(\mathbf{r}) = 175 \cdot e^{-(x-1.5)^2 - (y-0.2)^2} + 125 \cdot e^{-(x-0.6)^2 - (y-2.0)^2},$$

es decir, sobre cada fuente hay un residuo de SO_2 que se distribuye en forma gaussiana. Los parámetros de transformación química y difusión son, respectivamente, $\sigma = 0.36 \frac{1}{hr}$ y $\mu = 1.8 \frac{km^2}{hr}$ (estos datos y la intensidad de las fuentes se tomaron de [36]).

Se generó el campo de velocidad $U = (u, v)$ con la función corriente $\psi = \frac{5}{3}x^2 - 5y$, cuyas líneas de corriente son parábolas con dirección de suroeste a noreste, es decir,

$$u = -\frac{\partial \psi}{\partial y} = 5, \quad v = \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{10}{3}x,$$

y por lo tanto $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$. Este campo cumple que las componentes (horizontales y verticales) están entre 5 y 10 $\frac{km}{hr}$, en forma similar como en [36].

De esta forma, el SO_2 alcanza la región $\Omega = [1, 2] \times [1, 2]$, lo cual se observó durante las ocho horas de operación de las fuentes ($T = 8 \text{ hrs}$). Se calculó, según (2.17), la concentración promedio del contaminante en Ω durante el mismo periodo de tiempo ($\tau = T$), y se estimó $J_{\Omega, \tau} = 242.43 \frac{\mu g}{m^3}$, lo cual representa una violación a la norma sanitaria respectiva que es de $210 \frac{\mu g}{m^3}$. Se consideró este dato como norma sanitaria porque a esta concentración (0.08 ppm) se presentan síntomas de broncoconstricción en la población más vulnerable^[45].

La figura 4.3.1 muestra las isolíneas de la concentración del SO_2 y la función adjunta en diferentes tiempos, y se observa un incremento de la especie contaminante en Ω debido al viento que va de suroeste a noreste; dicha concentración disminuye al final de la jornada de operación de las fuentes contaminantes. Las isolíneas de la función adjunta indican el arrastre de la función escalon $p(\mathbf{r}, t)$ en la dirección $-\mathbf{U}$. La figura 4.3.2 muestra las respectivas superficies para la concentración del SO_2 y la función adjunta, ésta última también se usó en (3.8) para estimar la concentración promedio, resultando de nuevo $J_{\Omega, \tau} = 242.43 \frac{\mu g}{m^3}$.

Las figuras 4.3.3 y 4.3.4 contienen las tasas de emisión que se obtienen al aplicar las estrategias de control en ambas fuentes contaminantes. Los resultados de operación con estas tasas se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 4.3

Tasas de emisión	$J_{\Omega, \tau} \left(\frac{\mu g}{m^3} \right)$
Q_1 y Q_2	242.43
Q_{11}^* y Q_{12}^*	210.00
Q_{21}^* y Q_{22}^*	142.27
Q_{31}^* y Q_{32}^*	210.00
$Q_{41}^* = 0.8 \cdot Q_{11}^* + 0.2 \cdot Q_{21}^*$ $Q_{42}^* = 0.8 \cdot Q_{12}^* + 0.2 \cdot Q_{22}^*$	196.45
$Q_{51}^* = 0.3 \cdot Q_{11}^* + 0.7 \cdot Q_{31}^*$ $Q_{52}^* = 0.3 \cdot Q_{12}^* + 0.7 \cdot Q_{32}^*$	210.00

Como era esperado, todas las estrategias de control satisfacen la norma sanitaria, sin embargo, sólo las estrategias de control óptimo (Q_{31}^* y Q_{32}^*): y control convexo (Q_{51}^* y Q_{52}^*), generan tasas de emisión con un perfil adecuado

a las tasas originales de operación, de hecho, las tasas óptimas son la mejor elección en este ejemplo, ya que inician y concluyen la jornada de trabajo en cero emisiones, además, representan respectivamente el 88 % y el 84 % de las tasas originales Q_1 y Q_2 , lo cual implica que son controles sencillos de implementar.

Las tasas de emisión que se obtienen con la segunda estrategia de control (Q_{21}^* y Q_{22}^*) son en este caso estacionarias, pero están muy por debajo del máximo con que pueden operar las fuentes ($\delta_1 = 5000 \frac{kg}{hr}$ y $\delta_2 = 4000 \frac{kg}{hr}$), y esto claramente las descarta.

Finalmente, las tasas definidas por la primera estrategia de control (Q_{11}^* y Q_{12}^*), podrían representar una alternativa de operación sólo en el caso de que ambas fuentes industriales contaran con la capacidad de iniciar actividades cerca de su máximo acostumbrado.

Para todos los ejemplos que se han expuesto se obtuvo que el problema de control respectivo presenta una infinidad de soluciones. Esto es resultado de que en todos los casos el parámetro $\hat{\alpha}$ es positivo. Para los Ejemplos 4.1 y 4.2 se tiene $\hat{\alpha} = J_0 = 1.5$, ya que $\int_D \phi^0(r)g(r, 0) dr = 0$; y en el Ejemplo 4.3 $\hat{\alpha} = 207.02$, ya que $\int_D \phi^0(r)g(r, 0) dr = 2.98$. En este último caso, el impacto de la distribución inicial del contaminante sobre Ω es bajo aun cuando ϕ^0 no tiene valores pequeños, esto se debe a la dispersión provocada por el viento de entre 5 y 10 $\frac{km}{hr}$ en las ocho horas de operación de la fuentes industriales, de esto se concluye que la operación diaria de estas fuentes es la responsable de la violación de la norma sanitaria en zonas cercanas a las factorías.

Fig. 4.1.1. Tasas de emisión.

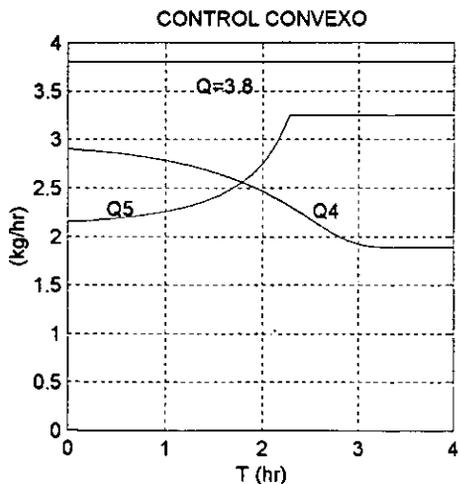
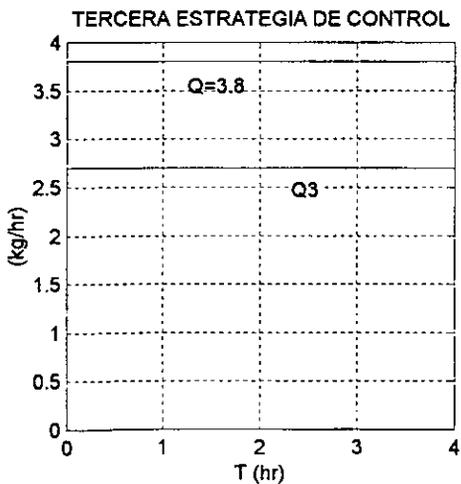
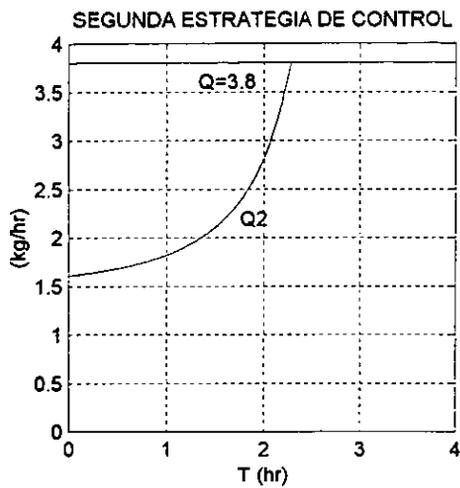
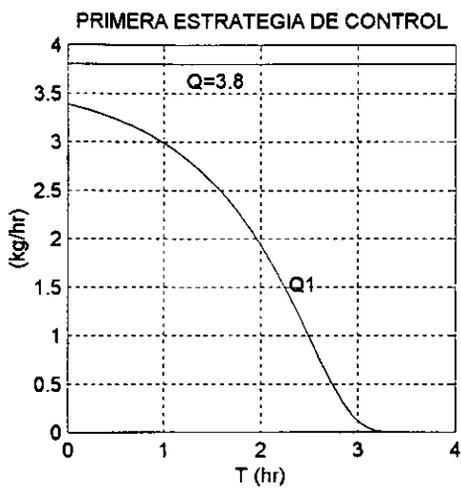


Fig. 4.2.1. Tasas de emisión.

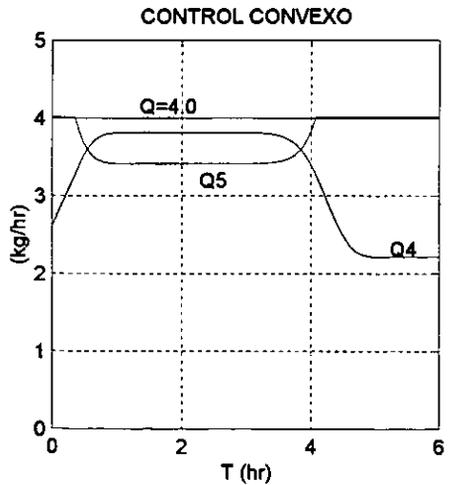
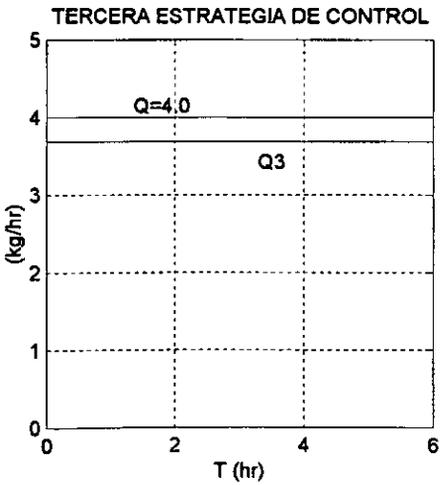
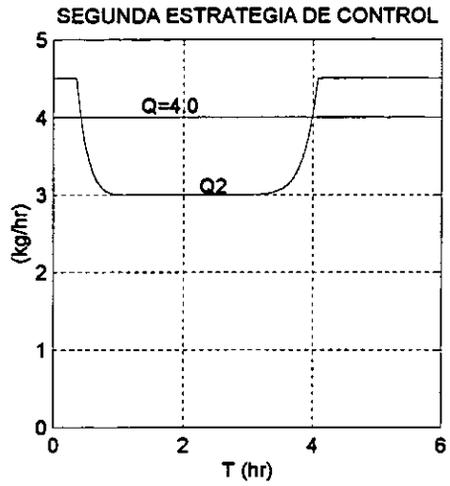
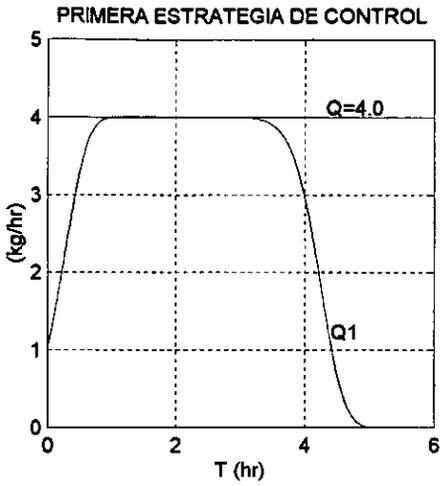


Fig. 4.3.1. Isolneas de la concentración de SO₂ y la función adjunta.

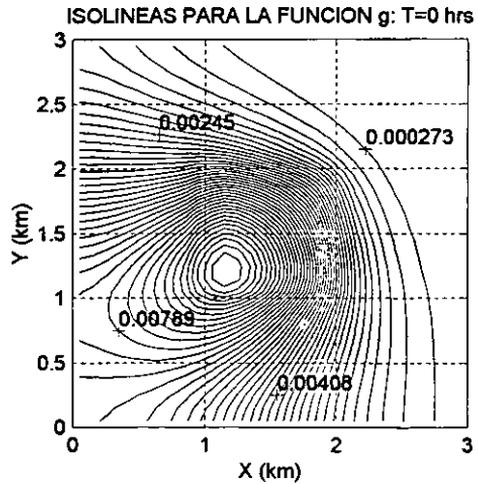
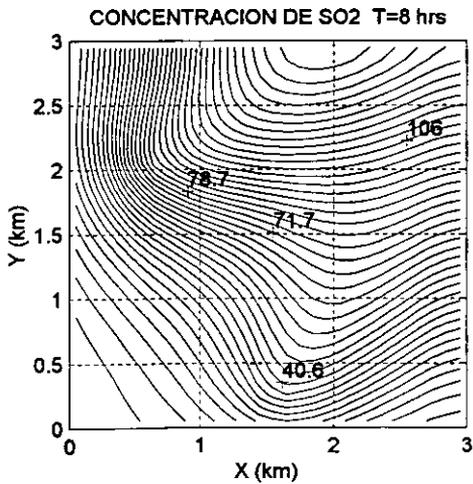
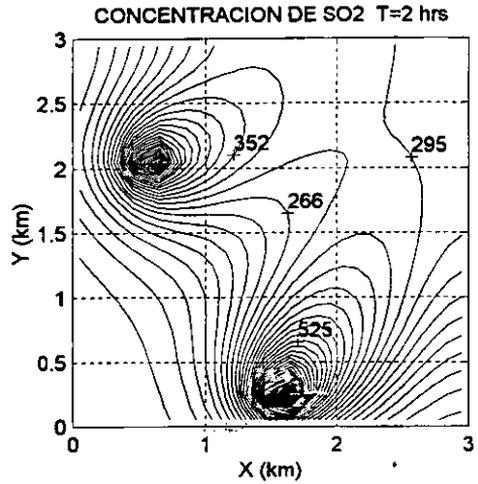
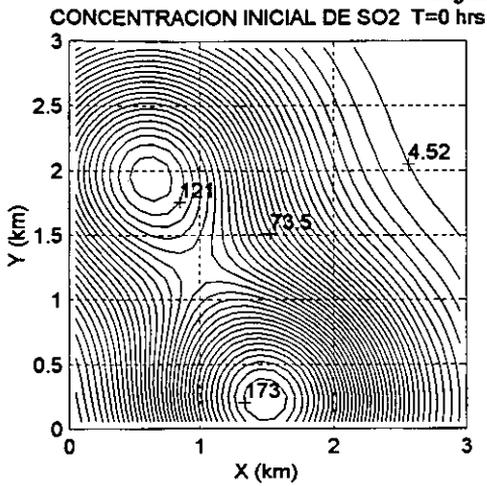
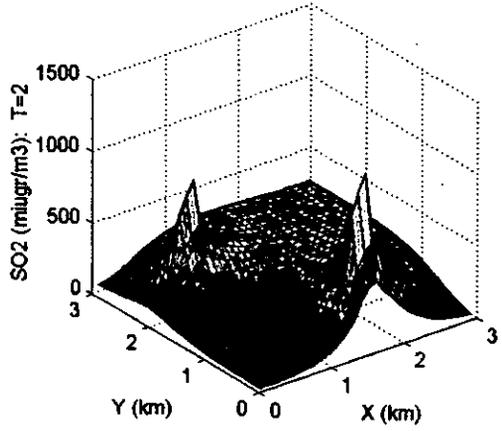
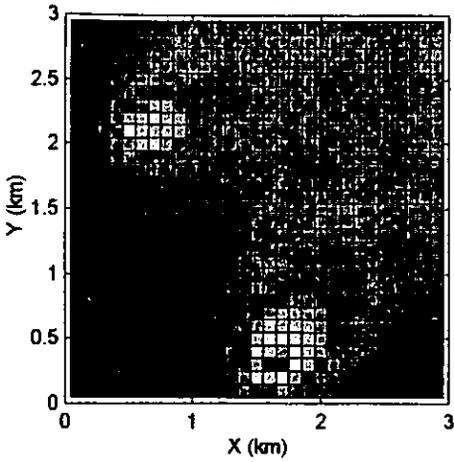


Fig. 4.3.2. Superficies de concentración de SO_2 y la función adjunta.

CONCENTRACION DE SO_2 T=2 hrs



FUNCION ADJUNTA T=0 hrs

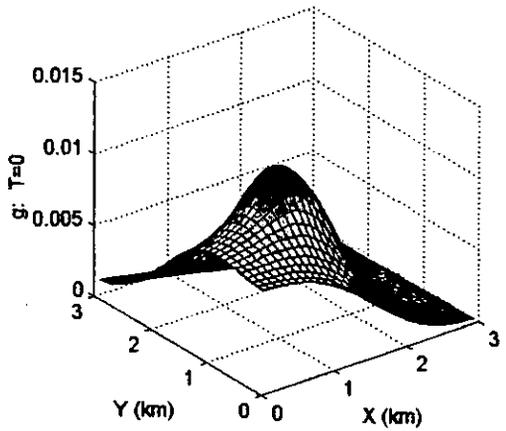
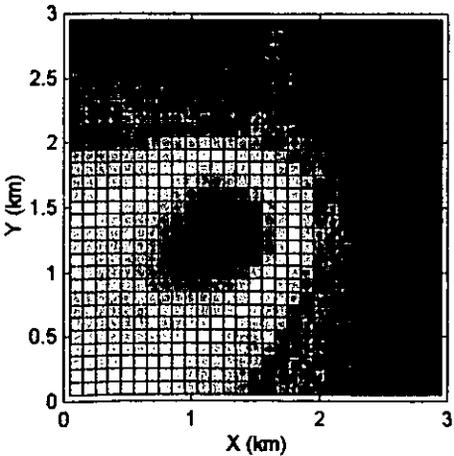


Fig. 4.3.3. Tasas de emisión para la fuente 1.

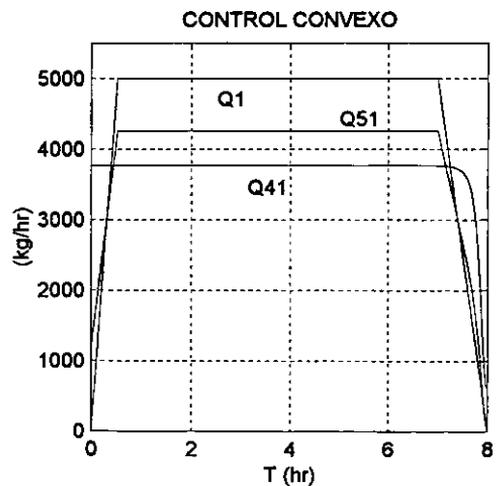
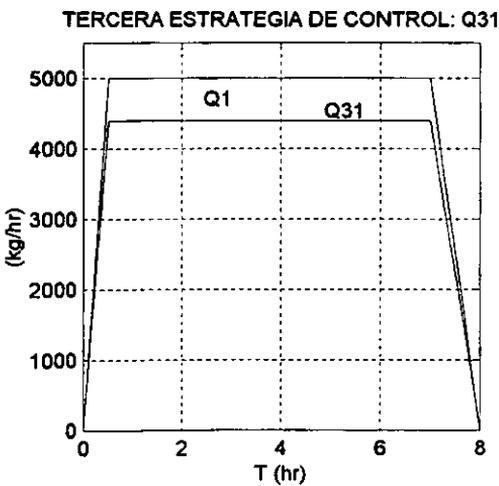
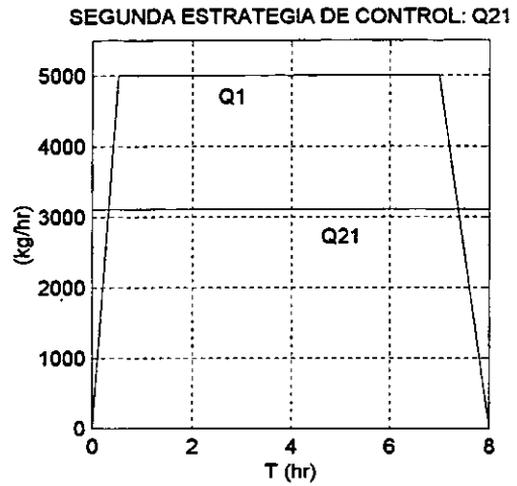
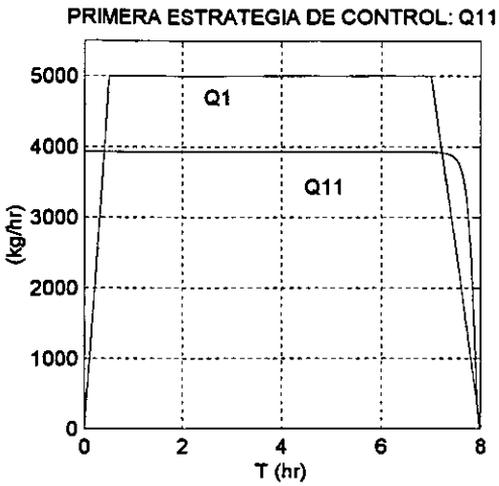
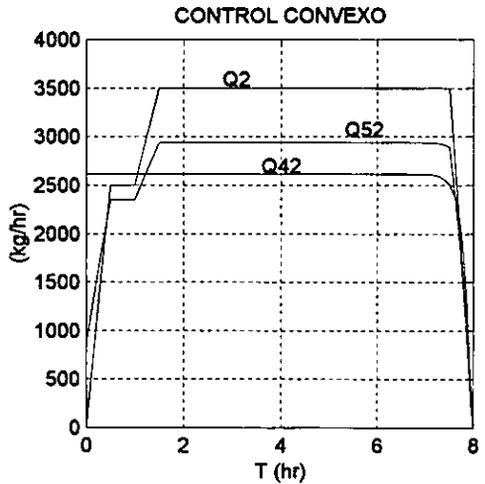
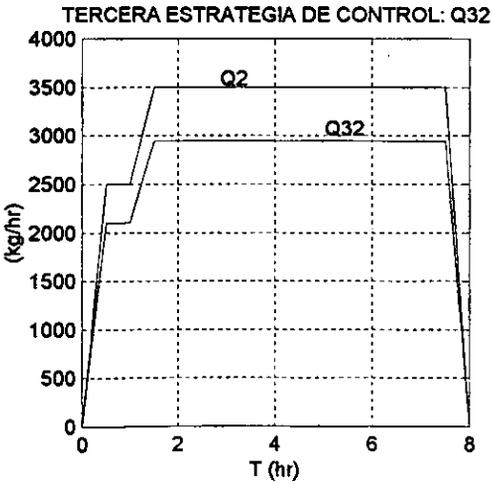
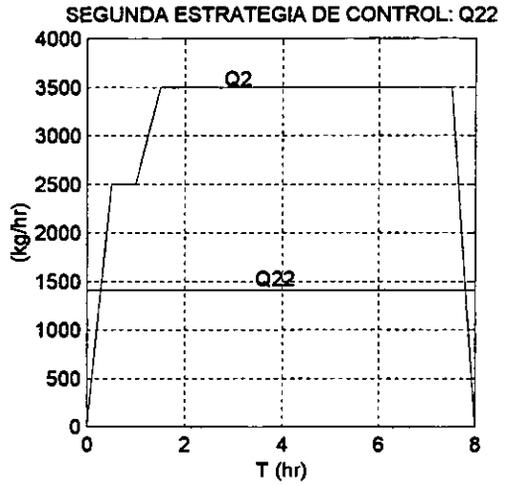
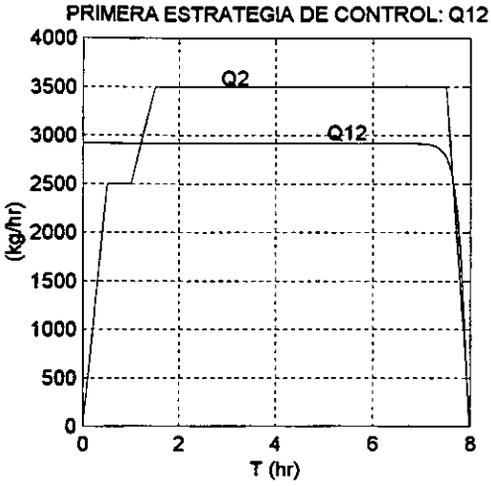


Fig. 4.3.4. Tasas de emisión para la fuente 2.



Capítulo 5

Esquema de solución numérica

En este capítulo se describe la técnica numérica que se aplica para obtener las soluciones de los modelos diferenciales (2.1)-(2.5) y (3.2)-(3.5), los cuales, aun cuando proporcionan diferente información para el problema de control, tienen una estructura similar, es decir, ambos representan modelos de transporte. De particular importancia resulta la solución numérica del modelo adjunto (3.2)-(3.5), ya que ésta es fundamental para construir todas las estrategias de control desarrolladas en el Capítulo 4.

La técnica que se aplica en ambos problemas diferenciales se basa en la *separación de operadores componente por componente*, de la cual existen diferentes realizaciones, sin embargo, en este trabajo se aplica el esquema de orden dos simétrico^[19,22], el cual tiene su origen en el esquema de Crank-Nicolson^[7].

5.1. Esquema de Crank-Nicolson

Para derivar este esquema de aproximación numérica, se considera el siguiente problema de evolución general que contiene como casos particulares a los modelos de dispersión y su adjunto:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + A\phi = f, \quad (5.1)$$

$$\phi(0) = \phi^0, \quad (5.2)$$

y se supone que ϕ , ϕ^0 y f son funciones suficientemente suaves. Además, se supone que el operador diferencial denotado por A ya se ha discretizado

en espacio, de tal forma que se tiene una matriz positiva-semidefinida (en la sección 2.2 se verificó que A tiene esta propiedad).

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

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

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

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

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

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

Al aplicar estas fórmulas a la ecuación (5.1) y despreciar los términos $o(\tau^2)$, se obtiene el modelo discreto de segundo orden llamado *esquema de Crank-Nicolson*:

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

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

Agrupando términos en la última ecuación se tiene que

$$\begin{aligned} (I + \frac{\tau}{2}A^k)\phi^{k+1} &= (I - \frac{\tau}{2}A^k)\phi^k + \tau f^{k+\frac{1}{2}}, \quad k = 0 \dots M-1, \\ \phi^0 &= \phi(0), \end{aligned} \tag{5.3}$$

por lo cual se concluye que el esquema es implícito. Es importante notar que para calcular la aproximación de ϕ en cada nivel de tiempo, es necesario resolver un sistema lineal de ecuaciones algebraicas donde la matriz del sistema

$(I + \frac{\tau}{2}A^k)$ es definida positiva (no singular), y por lo tanto, la solución existe de forma única. Esta característica es esencial, y se repite en los métodos de separación de operadores que se exponen más adelante.

El esquema definido por (5.3) es estable respecto de pequeñas perturbaciones en la condición inicial y el forzamiento. Para mostrar esto se establece el siguiente resultado.

Lema 5.1. Sea A una matriz $N \times N$ positiva-semidefinida y $\sigma \geq 0$, entonces se tiene que

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

(ii) $\|(I + \sigma A)^{-1}\|_2 \leq 1$.

Demostración. Para la primera parte, sea $L = (I - \sigma A)(I + \sigma A)^{-1}$,

$$\|L\|_2^2 = \sup_{\phi \neq 0} \frac{\|L\phi\|_2^2}{\|\phi\|_2^2} = \sup_{\phi \neq 0} \frac{((I - \sigma A)(I + \sigma A)^{-1}\phi, (I - \sigma A)(I + \sigma A)^{-1}\phi)}{(\phi, \phi)},$$

sea $\psi = (I + \sigma A)^{-1}\phi$, entonces

$$\|L\|_2^2 = \sup_{\psi \neq 0} \frac{((I - \sigma A)\psi, (I - \sigma A)\psi)}{((I + \sigma A)\psi, (I + \sigma A)\psi)} = \sup_{\psi \neq 0} \frac{(\psi, \psi) - 2\sigma(A\psi, \psi) + \sigma^2(A\psi, A\psi)}{(\psi, \psi) + 2\sigma(A\psi, \psi) + \sigma^2(A\psi, A\psi)},$$

y ya que $(A\psi, \psi) \geq 0$ se tiene que $\|L\|_2^2 \leq 1$.

Para la segunda parte del teorema, se debe observar lo siguiente:

$$\|(I + \sigma A)^{-1}\|_2^2 = \sup_{\psi \neq 0} \frac{(\psi, \psi)}{((I + \sigma A)\psi, (I + \sigma A)\psi)} = \frac{1}{\inf_{\psi \neq 0} \frac{((I + \sigma A)\psi, (I + \sigma A)\psi)}{(\psi, \psi)}},$$

desarrollando términos se obtiene

$$\|(I + \sigma A)^{-1}\|_2^2 = \frac{1}{\inf_{\psi \neq 0} \left(1 + 2\sigma \frac{(\psi, A\psi)}{(\psi, \psi)} + \sigma^2 \frac{(A\psi, A\psi)}{(\psi, \psi)}\right)} \leq 1,$$

ya que $(A\psi, \psi) \geq 0$. \square

El esquema de aproximación numérica definido por (5.3) se puede escribir como

$$\phi^{k+1} = T^k \phi^k + \tau S^k f^{k+\frac{1}{2}}, \quad (5.4)$$

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

Tomando norma en (5.4) se tiene

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

aplicando el Lema 5.1, definiendo $\|f\| = \max_j \|f^j\|_2$, y observando que

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

se obtiene que

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

Finalmente, es posible escribir

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

Ya que (5.4) es un proceso lineal, entonces, de la última acotación, se concluye la estabilidad incondicional del esquema (5.3) respecto de perturbaciones en el forzamiento y la condición inicial.

Según el Teorema de Convergencia de Lax^[22], para un esquema de aproximación numérica que presenta estabilidad, y orden de aproximación mayor o igual que uno (consistencia), se concluye también que dicho esquema es convergente, es decir, cuando Δx , Δy , y $\tau \rightarrow 0$ se tiene que

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

Por lo tanto, el esquema de Crank-Nicolson es convergente.

Las características de este esquema de solución numérica, asociadas al modelo general de evolución (5.1)-(5-2), indican que este método representa una buena técnica para resolver los modelos de dispersión y su adjunto, sin embargo, se requiere de un gran esfuerzo computacional para realizar (5.3), ya que la dimensión de la matriz A es igual al número de nodos considerados en la discretización del dominio D , que en general es un número grande, y por lo tanto, se complica la solución del sistema algebraico. Cuando se aplican diferencias finitas centradas de segundo orden en la discretización del operador diferencial sobre D , se obtiene que la matriz A es tridiagonal por bloques, y cada bloque es a su vez una matriz tridiagonal, esta estructura y la dimensión de A es lo que implica un alto tiempo de cómputo para obtener la solución de los sistemas algebraicos en (5.3). La alternativa a esta dificultad computacional es un esquema de separación de operadores.

5.2. Separación de operadores componente por componente.

Algunos problemas de la física-matemática pueden ser reducidos a una cadena de problemas más simples los cuales son resueltos en forma eficiente por computadora. Este tipo de reducción es posible en los casos donde el operador positivo-semidefinido, que caracteriza al modelo, es descompuesto en la suma de operadores positivos-semidefinidos con estructura simple. Tales métodos son conocidos como *métodos de separación de operadores*. Estos métodos fueron introducidos^[19,22] por Douglas, Peaceman y Rachford, y desarrollados por Godunov, Yanenko, Samarskii y Marchuk, entre otros.

Los métodos de separación de operadores fueron originalmente formulados y teóricamente justificados para operadores positivos-semidefinidos que conmutan. Estos métodos introducidos por diferentes autores son equivalentes y sólo difieren en su implementación.

En lo que sigue se describe uno de los métodos más importantes de separación de operadores, conocido como *método de separación componente por componente*, y como se muestra, este método no sólo se aplica para operadores que conmutan.

Se considera la ecuación de evolución general (5.1) en forma homogénea, y se supone que el operador diferencial A fue aproximado por diferencias finitas en espacio, de tal forma que se tiene una matriz positiva-semidefinida. Se supone que A se puede descomponer en dos matrices positivas-semidefinidas A_1 y A_2 de tal forma que

$$A = A_1 + A_2.$$

En general, A_1 y A_2 dependen del tiempo, por lo tanto, se aproximan de la siguiente manera

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

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

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

$$\frac{\phi^{k+\frac{1}{2}} - \phi^k}{\tau} + \Lambda_1^k \frac{\phi^{k+\frac{1}{2}} + \phi^k}{2} = 0, \quad (5.5)$$

$$\frac{\phi^{k+1} - \phi^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} + \Lambda_2^k \frac{\phi^{k+1} + \phi^{k+\frac{1}{2}}}{2} = 0. \quad (5.6)$$

Combinando (5.5) y (5.6) para eliminar $\phi^{k+\frac{1}{2}}$ se obtiene

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

donde

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

Ya que $\|T^k\|_2 \leq 1$ (Lema 5.1), se tiene que el esquema (5.5)-(5.6) es absolutamente estable, (se debe observar que $(I + \frac{\tau}{2}\Lambda_\alpha^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}\Lambda_\alpha^k) = (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_\alpha^k)(I + \frac{\tau}{2}\Lambda_\alpha^k)^{-1}$, $\alpha = 1, 2$). Para demostrar que el esquema también es consistente es necesario el siguiente lema.

Lema 5.2. Sea T una matriz real $N \times N$ tal que $\|T\| < 1$, entonces

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

Demostración. Para la parte (i), se supone que existe $\mathbf{x} \neq 0$ tal que $(I - T)\mathbf{x} = 0$, entonces

$$\|\mathbf{x}\| = \|T\mathbf{x}\| \leq \|T\| \|\mathbf{x}\| \Rightarrow 1 \leq \|T\|,$$

lo cual es una contradicción. Por lo tanto, $(I - T)\mathbf{x} = 0$ sólo tiene la solución trivial $\mathbf{x} = 0$, de aquí se deduce que $I - T$ es de rango máximo, por lo cual $I - T$ es no singular.

Para la parte (ii), se observa que

$$(I - T)S_m = I - T^{m+1},$$

donde $S_m = (I + T + T^2 + \dots + T^m)$.

Por otra parte,

$$\|S_m - (I - T)^{-1}\| = \|(I - T)^{-1} \cdot T^{m+1}\| \leq \|(I - T)^{-1}\| \|T\|^{m+1} \rightarrow 0,$$

cuando $m \rightarrow \infty$, por lo que se cumple la igualdad en (ii).

Para la parte (iii), se tiene que para cualquier $\varepsilon > 0$ existe m tal que

$$\|(I - T)^{-1}\| \leq \|(I - T)^{-1} - S_m\| + \|S_m\| < \varepsilon + 1 + \|T\| + \|T\|^2 + \dots + \|T\|^m,$$

usando la serie geométrica para $\|T\|$ se obtiene:

$$\|(I - T)^{-1}\| < \varepsilon + \frac{1}{1 - \|T\|}.$$

Como ε es arbitrario se tiene el resultado. \square

Para τ suficientemente pequeño se cumple que $\frac{\tau}{2} \|\Lambda_1^k\|_2 < \frac{1}{2}$ y $\frac{\tau}{2} \|\Lambda_2^k\|_2 < \frac{1}{2}$, entonces por el Lema 5.2 es posible escribir

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

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

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

La última ecuación muestra que el esquema (5.5)-(5.6) coincide con el esquema (5.3) hasta orden dos, y por lo tanto, se concluye que (5.5)-(5.6) es consistente. Nuevamente, el Teorema de Lax implica la convergencia del esquema.

La ventaja obtenida con esta separación de operadores es que la realización computacional del esquema (5.5)-(5.6) es más sencilla que la de (5.3), siempre y cuando A_1 y A_2 representen la descomposición del operador A en las direcciones x y y respectivamente. Esto se debe a que las fórmulas (5.5)-(5.6) implican la solución sucesiva de problemas unidimensionales con una estructura simple, es decir, sistemas algebraicos donde la matriz es tridiagonal de bajo orden, y por lo tanto de fácil solución.

La desventaja del esquema (5.5)-(5.6) es que se necesita que los operadores Λ_1^k y Λ_2^k conmuten, lo cual no se tiene en general. Cuando los operadores no conmutan la aproximación sólo es de primer orden. Por este motivo se propone un esquema más general.

Se aproximan A_1 y A_2 en el tiempo como

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

y se considera el nuevo esquema simétrico:

$$\frac{\phi^{k-\frac{1}{2}} - \phi^{k-1}}{\tau} + \Lambda_1^k \frac{\phi^{k-\frac{1}{2}} + \phi^{k-1}}{2} = 0, \quad (5.7)$$

$$\frac{\phi^k - \phi^{k-\frac{1}{2}}}{\tau} + \Lambda_2^k \frac{\phi^k + \phi^{k-\frac{1}{2}}}{2} = 0, \quad (5.8)$$

$$\frac{\phi^{k+\frac{1}{2}} - \phi^k}{\tau} + \Lambda_2^k \frac{\phi^{k+\frac{1}{2}} + \phi^k}{2} = 0, \quad (5.9)$$

$$\frac{\phi^{k+1} - \phi^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} + \Lambda_1^k \frac{\phi^{k+1} + \phi^{k+\frac{1}{2}}}{2} = 0. \quad (5.10)$$

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

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

donde

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

Desarrollando en serie de potencias a la matriz T^k (Lema 5.2), se tiene

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

donde $A^k = A(t_k)$. Esta última ecuación implica que el esquema (5.7)-(5.10) coincide hasta orden dos con el esquema de Crank-Nicolson aplicado a (5.1) en el intervalo $t_{k-1} \leq t \leq t_{k+1}$,

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

Se concluye que el esquema (5.7)-(5.10) es absolutamente estable (por el Lema 5.1 $\|T^k\|_2 \leq 1$), y de orden dos de aproximación, independientemente de que las matrices Λ_1^k y Λ_2^k conmuten o no. El Teorema de Lax garantiza la convergencia.

Para el caso no-homogéneo del problema general (5.1)-(5.2), el esquema de solución numérica anterior se generaliza con las siguientes ecuaciones:

$$\left\{ \begin{array}{l} (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)\phi^{k-\frac{1}{2}} = (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)\phi^{k-1}, \\ (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)(\phi^k - \tau f^k) = (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)\phi^{k-\frac{1}{2}}, \\ (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)\phi^{k+\frac{1}{2}} = (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)(\phi^k + \tau f^k), \\ (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)\phi^{k+1} = (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)\phi^{k+\frac{1}{2}}. \end{array} \right\}, \quad (5.11)$$

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

En forma similar a la demostración anterior, es posible probar^[22,37] que el esquema simétrico (5.11) es un método de aproximación de orden dos (absolutamente estable) para la ecuación (5.1). Por lo tanto, (5.11) es un esquema de solución numérica convergente.

5.3. Separación de operadores en la ecuación de transporte

Para lograr la adecuada aplicación del esquema (5.11) a los modelos de dispersión y su adjunto (modelos de transporte), se definen los operadores de separación A_1 y A_2 como sigue:

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

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

Si se considera que $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$, entonces claramente se satisface que

$$A = A_1 + A_2,$$

donde A representa tanto al operador diferencial de (2.1) como de (3.2), es decir,

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

Los operadores A_1 y A_2 separan el fenómeno de transporte en las direcciones x y y respectivamente.

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

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

Aplicando los cuatro casos de las condiciones de frontera (2.3)-(2.4) en $x = 0$ y $x = X$, es posible escribir el último término como

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

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

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

para toda función ϕ que satisface las condiciones (2.3)-(2.4). Un argumento similar prueba que A_2 también es un operador positivo-semidefinido.

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

El esquema de solución numérica (5.11) requiere que la discretización de las variables espaciales de cada operador diferencial preserve la propiedad anterior, es decir, las matrices A_1 y A_2 deben ser también positivas-semidefinidas. Para lograr ésto, se discretiza en espacio usando diferencias finitas centradas de orden dos sobre una malla doble (tipo c) de Arakawa. Las fórmulas de aproximación para cada término del operador A_1 son:

$$\left(\frac{1}{2} \sigma \phi \right)_{ij} = \frac{1}{2} \sigma_{ij} \phi_{ij}, \quad (5.12)$$

$$\left(\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (u \phi) + \frac{1}{2} u \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{ij} \cong \frac{u_{i+\frac{1}{2}j} \phi_{i+1j} - u_{i-\frac{1}{2}j} \phi_{i-1j}}{2\Delta x}, \quad (5.13)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right)_{ij} \cong \mu \frac{\phi_{i+1j} - 2\phi_{ij} + \phi_{i-1j}}{\Delta x^2}, \quad (5.14)$$

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

Las ecuaciones (5.12) y (5.14) son aproximaciones bien conocidas de orden dos, sin embargo, la fórmula (5.13) necesita una explicación; para ésto, se debe observar que

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

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

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

Simplificando la última expresión se obtiene (5.13).

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

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

Aplicando los cuatro casos discretos de las condiciones de frontera (2.3)-(2.4) en $x = 0$ y $x = X$, es posible reescribir los últimos términos para obtener

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

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

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

donde $\phi \in \mathfrak{R}^{N+M}$ y satisface las condiciones de frontera discretas (2.3)-(2.4).

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

Dadas las características de los operadores A_1 y A_2 antes descritas, es posible aplicar el esquema de solución numérica (5.11) a los modelos de dispersión y su adjunto. La realización de este esquema implica, con la discretización antes formulada, la solución sucesiva de sistemas lineales tridiagonales; ésto se debe a que hay que resolver problemas unidimensionales en las direcciones x y y (desacoplados), los cuales se discretizaron con fórmulas de diferencias finitas centradas con tres puntos.

Existen varios métodos para resolver estos sistemas tridiagonales^[13], entre los posibles métodos directos, uno, de los más usados, es el de factorización, el cual es computacionalmente económico, ya que es rápido y requiere poca memoria. En lo que sigue se describe dicho algoritmo.

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

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

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

Algoritmo de factorización

1) Sustitución hacia adelante.

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

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

2) Tomar

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

3) Sustitución hacia atrás.

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

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

Este algoritmo se aplicó dentro del método (5.11) para determinar las soluciones numéricas de los modelos diferenciales (2.1)-(2.5) y (3.2)-(3.5). Los programas desarrollados en MATLAB, para ambos modelos, están incluidos en el apéndice al final de esta tesis.

Para verificar el correcto desempeño de los programas desarrollados, se compararon las predicciones de los modelos numéricos de dispersión y su adjunto, con el valor esperado para la concentración promedio que se debe obtener según la ecuación de balance:

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

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

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

Esta ecuación permite comparar las estimaciones numéricas, directa y adjunta, de la concentración promedio del contaminante, con las integrales exactas de las tasas de emisión y la distribución inicial del contaminante.

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

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

y en el caso $Q_i = a_i t$ (Ejemplo 4.3), se obtiene

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

Se consideraron tres ejemplos donde se aplican las dos últimas ecuaciones en la siguiente forma, los lados izquierdos se evaluaron con los programas desarrollados, y los lados derechos (E) se calcularon en forma exacta. Los parámetros para dichos ejemplos están contenidos en la Tabla 5.1, y los parámetros de discretización, con el tiempo de cómputo (T_c), en la Tabla 5.2.

Tabla 5.1

Ej.	u	v	μ	Q_1	Q_2	r_1	r_2	X	Y
1	$-0.75x$	$0.75y$	0.04	3.8	0.0	(1.5, 0.5)	(0.0, 0.0)	2	2
2	$-0.5x$	$0.5y$	0.04	3.8	1.5	(1.5, 0.5)	(0.8, 0.8)	2	2
3	1.5	$0.84x$	0.8	$10^4 t$	$5 \cdot 10^3 t$	(1.5, 1.6)	(1.0, 1.6)	4	4

Tabla 5.2

Ej.	N_x	M_y	Δt	N_t	T	T_c	$ D $	$J_{D,T}$	E
1	50	50	0.02	50	1.0	$101''$	4.0	0.4749	0.4750
2	50	50	0.02	50	1.0	$102''$	4.0	0.6624	0.6625
3	30	30	0.004	100	0.4	$79''$	16.0	24.9998	25.0000

Al comparar las últimas dos columnas de la Tabla 5.2, se comprueba que los modelos discretos, y los programas correspondientes, satisfacen la ecuación de balance de masa (hasta segundo orden). Este resultado es de carácter general, y se prueba como sigue.

Se debe observar que

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

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

Con esta ecuación, y las condiciones de frontera (2.3) y (2.4) en su forma discreta, es posible probar que

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

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

donde

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

En forma análoga se tiene

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

Si se considera que

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

entonces, es posible escribir

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

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

Por otra parte, el esquema numérico (5.11) representa, hasta orden dos, la realización del método de Crank-Nicolson en el intervalo $t_{k-1} \leq t \leq t_{k+1}$, es decir,

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

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

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

la cual indica que la variación de la masa en un intervalo de longitud 2τ , es igual a la masa que ingresa a D por las fuentes puntuales, menos la pérdida de masa por los siguientes fenómenos: transformación química y flujo a través de la frontera. Esto significa que la ecuación discreta coincide (hasta orden dos) con la ecuación de balance de masa continua (2.12).

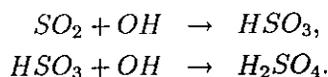
Capítulo 6

Control de contaminantes secundarios

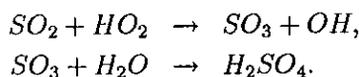
Una parte importante de los contaminantes emitidos a la atmósfera por fuentes puntuales sufre diversas reacciones químicas^[16,34], esto significa que una fracción de un contaminante primario se transforma en otras sustancias (contaminantes secundarios) que pueden ser más tóxicas que la sustancia original. El origen de este fenómeno de transformación está en la atmósfera, la cual es un medio sumamente oxidante, pues contiene un 21 % en volumen de oxígeno. A partir de este elemento, se generan otras especies más oxidantes: los radicales hidroxilo (OH) y nitrato (NO_3), principales responsables de los procesos atmosféricos oxidantes durante el día y la noche, respectivamente. También, otra especie originada por el oxígeno atmosférico muy oxidante es el ozono (O_3), que protagoniza, casi en exclusiva los procesos químicos en la estratósfera.

Además de los procesos de oxidación, también son relevantes en la atmósfera los procesos fotoquímicos, los cuales son un componente fundamental para la formación de ozono en la tropósfera a partir de los óxidos de nitrógeno (NO_x).

Las sustancias ácidas como el H_2SO_4 (ácido sulfúrico) y el HNO_3 (ácido nítrico), son ejemplos de contaminantes secundarios agresivos^[4,34]. El caso particular del H_2SO_4 tiene su origen en las instalaciones fijas como las fábricas y, sobre todo, en las centrales termoeléctricas que queman carbón mineral o combustóleo con alto contenido de azufre. Las emisiones de estas instalaciones tienen un alto contenido de SO_2 (dióxido de azufre), y esta sustancia se transforma en el ácido al reaccionar con los radicales hidroxilo presentes en la atmósfera en forma natural, es decir,



O también,

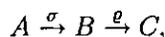


Este ácido no sólo es un fuerte irritante de vías respiratorias en los humanos, sino también un elemento que deteriora materiales (formados de carbonato de calcio), pinturas, y transforma el PH de lagos, reduciendo las posibilidades de sobrevivencia de algunas especies.

La formación de esta sustancia, y de aerosoles de sulfato ácidos, se favorece con una mala dispersión del contaminante primario y elevada insolación ([45]), por lo tanto, se tiene la necesidad de realizar control sobre las fuentes puntuales ante estas condiciones atmosféricas adversas.

En lo que sigue se presenta un modelo matemático de dispersión, dentro del contexto de control a corto plazo, que considera fuentes puntuales de emisión de un contaminante primario, el cual origina mediante reacciones sucesivas de primer orden^[44], la acumulación de una especie contaminante secundaria. Con este modelo (y su adjunto) se pretende extender las estrategias de control desarrolladas en el Capítulo 4 para ser aplicadas al contaminante secundario.

Para este modelo se considera el siguiente mecanismo de transformación simplificado



donde A denota el contaminante primario y B es la especie secundaria. En este caso la *ley de velocidades* de la reacción tiene la siguiente forma:

$$\frac{\partial[B]}{\partial t} = \sigma[A] - \rho[B], \quad (6.1)$$

donde los corchetes denotan concentración. Los mecanismos de reacción de este tipo sólo representan una primera aproximación al complejo fenómeno de la reactividad en la atmósfera.

6.1. Modelo de dispersión y su adjunto

La dispersión de contaminantes emitidos a la atmósfera por fuentes fijas o móviles, es un fenómeno tridimensional no-estacionario. Sin embargo, en eventos extremos de contaminación a corto plazo, es decir, cuando existe un débil movimiento de masa de aire en la vertical durante algunas horas ($T > 0$), se tiene un aumento de la concentración de los contaminantes cerca del suelo y donde se emiten. Cuando el evento es de gran estabilidad atmosférica (inversión térmica), se tiene que los contaminantes se acumulan en una delgada capa de altura h . En estas condiciones (al despreciar movimientos en la vertical), si se integra la ecuación Euleriana de dispersión^[34], respecto la variable z en el intervalo $[0, h]$, y se divide entre h , se obtiene un modelo bidimensional. La variable en este modelo representa la concentración promedio del contaminante en una columna de aire de altura h .

Considerando la aproximación anterior, un modelo bidimensional de dispersión (a corto plazo), para un contaminante primario y uno secundario es el siguiente:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) = f(\mathbf{r}, t) \quad \text{en } D \times (0, T), \quad (6.2)$$

$$\phi(\mathbf{r}, 0) = \phi^0(\mathbf{r}) \quad \text{en } D, \quad (6.3)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} - U_n \phi = 0 \quad \text{en } S^-, \quad (6.4)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{en } S^+, \quad (6.5)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla c + \rho c - \nabla \cdot (\mu \nabla c) = \sigma \phi \quad \text{en } D \times (0, T), \quad (6.6)$$

$$c(\mathbf{r}, 0) = c^0(\mathbf{r}) \quad \text{en } D, \quad (6.7)$$

$$\mu \frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}} - U_n c = 0 \quad \text{en } S^-, \quad (6.8)$$

$$\mu \frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{en } S^+, \quad (6.9)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad \text{en } D. \quad (6.10)$$

Donde ϕ y c representan las concentraciones de los contaminantes primario y secundario, respectivamente. $\mathbf{U} = \mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$ denota la velocidad del viento en D (región de estudio), y se supone que cumple la ecuación de continuidad (6.10). $\sigma > 0$ y $\rho > 0$ son los coeficientes de transformación química de las especies contaminantes primaria y secundaria, respectivamente, y $\mu > 0$ es el coeficiente de difusión turbulenta.

En la ecuación (6.2), $f(\mathbf{r}, t)$ es el forzamiento formado por las fuentes puntuales de emisión del contaminante primario, las cuales se ubican en los puntos $\mathbf{r}_i \in D$, $i = 1..N$, es decir,

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

y $Q_i(t)$, ($i = 1..N$), son las tasas de emisión de cada planta industrial. Es importante notar que en la ecuación (6.6), el forzamiento está dado por la concentración del contaminante primario según la ley de velocidades (6.1), y por lo tanto, las ecuaciones están semi-acopladas.

En las ecuaciones (6.3) y (6.7), ϕ^0 y c^0 son las distribuciones espaciales de las especies contaminantes, primaria y secundaria, al tiempo $t = 0$ sobre D , es decir, son los residuos de contaminación en la atmósfera que dejó la actividad industrial en el pasado inmediato.

Al considerar el modelo de dispersión de contaminantes (6.2)-(6.10), se supone que se ha tomado una región de frontera abierta D , suficientemente grande para contener todas las fuentes puntuales que emiten la especie contaminante primaria en la zona, de esta forma, y considerando que la advección domina sobre la difusión, las condiciones de frontera reflejan el supuesto de que no ingresa masa contaminante desde afuera sumandose a la emitida por las fábricas y, por lo tanto, que la contaminación sólo fluye de D hacia afuera siguiendo el campo \mathbf{U} .

Para modelar esta situación, la frontera S de D se divide en dos partes dependiendo de si el viento sale de D o entra, es decir, S^+ se define como los puntos de S tal que $U_n = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} \geq 0$, donde \mathbf{n} es el vector normal exterior, y S^- se define como el complemento ($U_n = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} < 0$). Las condiciones de frontera (6.4) y (6.8) dicen que cuando el viento ingresa a D , el flujo total de los contaminantes (primario y secundario) a través de S^- , tomando en cuenta difusión turbulenta y advección, es igual a cero, por lo cual en S^- no

hay entrada ni salida de contaminantes. Las condiciones de frontera (6.5) y (6.9) dicen que cuando el viento sale de D se desprecia el flujo difusivo turbulento en comparación con el flujo advectivo, por lo tanto, por S^+ salen los contaminantes sólo debido a la advección.

Estas condiciones de frontera, además del adecuado sentido físico, tienen buenas características matemáticas, ya que hacen del modelo (6.2)-(6.10) un problema bien formulado en el sentido de Hadamard, es decir, la solución del modelo es única y estable respecto de pequeñas perturbaciones en las condiciones iniciales, más aún, es posible mostrar que la solución es estable respecto de pequeñas perturbaciones en el forzamiento. Estas conclusiones se siguen de las siguientes desigualdades:

$$\|\phi\| \leq T \max_{0 \leq t \leq T} \|f(r, t)\| + \|\phi^0\|, \quad y$$

$$\|c\| \leq T^2 \cdot M \cdot \max_{0 \leq t \leq T} \|f(r, t)\| + T \cdot M \cdot \|\phi^0\| + \|c^0\|,$$

donde $M = \max \{\sigma(r, t), r \in D, 0 \leq t \leq T\}$, y la norma se define por $\|\zeta\|^2 = \int_D \zeta^2 dr$. En forma similar a los resultados del Capítulo 2, aquí se usó que los operadores diferenciales espaciales de (6.1) y (6.5) son positivos-semidefinidos.

Por otra parte, si se considera la concentración de la mezcla contaminante ($C = \phi + c$), e integramos sobre D las ecuaciones (6.2) y (6.6), es posible establecer la siguiente ecuación de *balance de masa*:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D C dr = \sum_{i=1}^N Q_i(t) - \int_{S^+} U_n C dS - \int_D \rho c dr.$$

Esta ecuación afirma que la razón de cambio de la masa de la mezcla contaminante en D , depende de la razón a la cual ingresa masa del contaminante primario, menos la razón a la cual sale de D la masa de la mezcla, menos la razón de la destrucción de la masa del contaminante secundario. Lo cual está de acuerdo con el fenómeno que se estudia.

Modelo adjunto

Como se mencionó en la introducción, el objetivo es controlar las tasas de emisión para mantener la concentración promedio del contaminante secundario por debajo de su norma sanitaria (J_0^S). Es posible que esta meta sólo

se requiera cumplir en alguna zona Ω de especial sensibilidad dentro de D , por ejemplo, en una zona densamente poblada. Por lo tanto, en el caso más general, el objetivo es satisfacer la siguiente desigualdad

$$J_{\Omega, \tau}^S = \frac{1}{|\Omega| \cdot \tau} \int_{\Omega} \int_{T-\tau}^T c(\mathbf{r}, t) dt dr \leq J_0^S, \quad (6.11)$$

donde $|\Omega|$ denota el área de la zona Ω , y $\tau > 0$ es el tiempo durante el cual se requiere el control. Como se apuntó en el Capítulo 4, el control sobre las tasas de emisión sólo es necesario en el caso de que el modelo de dispersión (6.2)-(6.10) tenga un pronóstico desfavorable sobre la concentración del contaminante secundario, es decir, $J_{\Omega, \tau}^S > J_0^S$.

Para satisfacer la condición (6.11), es necesario escribir $J_{\Omega, \tau}^S$ de tal forma que las tasas de emisión se tengan en forma explícita. Para lograr esto se considera el modelo adjunto asociado al modelo de dispersión (6.2)-(6.10),

$$-\frac{\partial g}{\partial t} - \mathbf{U} \cdot \nabla g + \rho g - \nabla \cdot (\mu \nabla g) = p(\mathbf{r}, t) \quad \text{en } D \times (0, T), \quad (6.12)$$

$$g(\mathbf{r}, T) = 0 \quad \text{en } D, \quad (6.13)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} + U_n g = 0 \quad \text{en } S^+, \quad (6.14)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{en } S^-, \quad (6.15)$$

$$-\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \mathbf{U} \cdot \nabla \varphi + \sigma \varphi - \nabla \cdot (\mu \nabla \varphi) = P(\mathbf{r}, t) \quad \text{en } D \times (0, T), \quad (6.16)$$

$$\varphi(\mathbf{r}, T) = 0 \quad \text{en } D, \quad (6.17)$$

$$\mu \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} + U_n \varphi = 0 \quad \text{en } S^+, \quad (6.18)$$

$$\mu \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \text{en } S^-. \quad (6.19)$$

Donde los forzamientos en la ecuaciones (6.12) y (6.16) se definen por:

$$p(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} \frac{1}{|\Omega|^\tau} & (\mathbf{r}, t) \in \Omega \times (T - \tau, T) \\ 0 & (\mathbf{r}, t) \notin \Omega \times (T - \tau, T) \end{cases}, \quad y$$

$$P(\mathbf{r}, t) = \sigma \cdot g(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{r} \in D, \quad 0 \leq t \leq T.$$

En forma similar al modelo de dispersión (6.2)-(6.10), este modelo adjunto tiene solución única, la cual es estable respecto de pequeñas perturbaciones en las condiciones finales y el forzamiento $p(\mathbf{r}, t)$. La demostración de estas propiedades sólo requiere escribir el modelo de valores finales como un modelo de valores iniciales, lo cual se logra con el cambio de variable $t' = T - t$.

Finalmente, al combinar el modelo de dispersión y su adjunto, es posible obtener una formulación alternativa (principio de dualidad), para la concentración promedio del contaminante secundario,

$$J_{\Omega, \tau}^S = \sum_{i=1}^N \int_0^T \varphi(\mathbf{r}_i, t) Q_i(t) dt + \int_D \varphi(\mathbf{r}, 0) \phi^0(\mathbf{r}) dr + \int_D g(\mathbf{r}, 0) c^0(\mathbf{r}) dr. \quad (6.20)$$

Es importante notar que las funciones adjuntas φ y g son independientes de las tasas de emisión (ver 6.12-6.19), y por lo tanto, en (6.20) sólo actúan como funciones de peso que ponderan las condiciones iniciales y la tasa de emisión de cada planta industrial.

Las dos últimas integrales en la igualdad (6.20), determinan el impacto que la distribución inicial de los contaminantes (primario y secundario), tendrá sobre la concentración promedio del contaminante secundario en Ω . Si estas integrales tienen un valor elevado, es posible, que aun cuando las plantas paren totalmente sus actividades, se viole la norma de calidad del aire respectiva ($J_{\Omega, \tau}^S > J_0^S$). Por lo tanto, las dos últimas integrales en la ecuación (6.20) son un indicador de cuando es posible satisfacer (6.11).

6.2. Control óptimo

Las estrategias de control desarrolladas en el Capítulo 4 para un contaminante primario se pueden extender en forma inmediata para el control de un contaminante secundario, sin embargo, por las ventajas obtenidas con la

tercera estrategia de control (control óptimo), esta estrategia es la que se generaliza.

Se define el parámetro $\hat{\alpha}_S$ como sigue,

$$\hat{\alpha}_S = J_0^S - \int_D \varphi(\mathbf{r}, 0)\phi^0(\mathbf{r})d\mathbf{r} - \int_D g(\mathbf{r}, 0)c^0(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (6.21)$$

Este parámetro caracteriza el conjunto solución del problema de control en la siguiente forma.

Si $\hat{\alpha}_S = 0$, entonces, la única opción para definir las tasas de emisión con el fin de satisfacer la desigualdad (6.11), es tomar

$$Q_i(t) = 0, \quad \forall i \text{ y } 0 \leq t \leq T,$$

es decir, se requiere el paro total de las actividades industriales durante el tiempo que duren las condiciones atmosféricas adversas.

Si $\hat{\alpha}_S < 0$, entonces, aun tomando $Q_i \equiv 0 \quad \forall i$, el pronóstico es que se violará la concentración máxima admisible J_0^S en la región Ω (no hay solución al problema de control), sin embargo, es importante notar que parar la actividad industrial reduce el riesgo de alcanzar niveles tóxicos del contaminante secundario.

El caso más interesante ocurre cuando $\hat{\alpha}_S > 0$, que corresponde al caso en que los residuos de los contaminantes primario y secundario, en la atmósfera, son pequeños para $t = 0$.

Cuando $\hat{\alpha}_S > 0$, y se tiene, de acuerdo al modelo de dispersión (6.2)-(6.10), un pronóstico desfavorable, es decir, $\sum_{i=1}^N \int_0^T \varphi(\mathbf{r}_i, t)Q_i(t)dt > \hat{\alpha}_S$, entonces se deben de diseñar tasas de emisión ($Q_i^* = Q_i^*(t)$), de tal forma que permitan que (6.11) se cumpla. Donde Q_i , en la última desigualdad, denota la tasa de emisión con la que usualmente trabaja la industria i -ésima (en general $Q_i(t) \leq \delta_i, \quad i = 1..N$).

Como se apuntó en el Capítulo 4, resulta natural diseñar las nuevas tasas Q_i^* de tal forma que aproximen (lo más posible), cualitativa y cuantitativamente a las tasas Q_i , por lo tanto, se buscan en la forma

$$Q_i^*(t) = \beta_i Q_i(t), \quad i = 1..N,$$

donde las β_i son constantes positivas de amortiguamiento. De esta forma, cada Q_i^* tiene una estructura temporal similar a la tasa original, y por lo tanto, la fuente industrial puede adaptarse más fácilmente a este control.

Las constantes de amortiguamiento β_i se buscan de tal forma que cada Q_i^* esté lo más cerca posible a Q_i (control óptimo), es decir, se quiere minimizar los términos $\int_0^T (Q_i^*(t) - Q_i(t))^2 dt$; y esto, a su vez, de tal manera que se cumpla la norma de la calidad del aire respectiva. Por lo tanto, se establece el siguiente problema de control óptimo,

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{\beta_i} H = \sum_{i=1}^N \|Q_i\|_{L_2(0,T)}^2 \cdot (\beta_i - 1)^2, \\ \text{sujeta a : } \left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^N a_i \beta_i = \hat{\alpha}_S, \\ \beta_1 \geq 0, \beta_2 \geq 0, \dots, \beta_N \geq 0. \end{array} \right. \end{array} \right\},$$

donde $a_i = \int_0^T \varphi(r_i, t) Q_i(t) dt > 0$ para $i = 1..N$; y como antes, se supone que con las tasas originales Q_i se tiene un pronóstico desfavorable $J_{\Omega, \tau}^S > J_0^S$, o en forma equivalente $\sum_{i=1}^N a_i > \hat{\alpha}_S$, con $\hat{\alpha}_S > 0$. $a_i > 0$ significa que sólo se consideran para el control aquellas fuentes que impactan a la región Ω con el contaminante secundario.

El problema anterior se puede escribir en forma equivalente como

$$(1) \left\{ \begin{array}{l} \min_{x_i} H = \sum_{i=1}^N (x_i - x_i^0)^2, \\ \text{sujeta a : } (2) \left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^N b_i x_i = \hat{\alpha}_S, \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \dots, x_N \geq 0. \end{array} \right. \end{array} \right\},$$

donde $x_i = \|Q_i\|_{L_2(0,T)} \cdot \beta_i$, $x_i^0 = \|Q_i\|_{L_2(0,T)} > 0$, y $b_i = \frac{a_i}{\|Q_i\|_{L_2(0,T)}} > 0$; además, $\sum_{i=1}^N b_i x_i^0 > \hat{\alpha}_S$, y el conjunto C de factibilidad queda definido por (2).

De acuerdo al Teorema 4.4, la solución a este problema de optimización existe y es única, además, por el Teorema 4.6, las constantes óptimas β_i^* satisfacen que

$$\beta_i^* \leq 1, \quad i = 1 \dots N.$$

Por lo tanto,

$$Q_i^*(t) \leq Q_i(t), \quad i = 1 \dots N, \quad 0 \leq t \leq T.$$

Esto significa que todas las fuentes industriales deben disminuir su actividad para controlar la concentración promedio del contaminante secundario.

Para determinar en forma explícita el mínimo del problema (1), se debe considerar la proyección ortogonal, derivada de las condiciones necesarias en el proceso de minimización con multiplicadores de Lagrange^[18]:

$$x_j^* = x_j^0 - \frac{\lambda}{2} b_j, \quad j = 1..N, \quad (6.22)$$

donde

$$\frac{\lambda}{2} = \frac{\sum_{i=1}^N b_i x_i^0 - \hat{\alpha}_S}{\sum_{i=1}^N b_i^2}. \quad (6.23)$$

Con esta elección se satisface que $\sum_{j=1}^N b_j x_j^* = \hat{\alpha}_S$.

En forma similar al problema de control de un contaminante primario, se debe considerar el siguiente algoritmo de búsqueda.

Algoritmo de proyecciones ortogonales sucesivas

Paso I. Si $x_j^* \geq 0$ para $j = 1..N$, entonces $\mathbf{x}^* \in C$ y

$$-\nabla H(\mathbf{x}^*) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}^*) = \lambda \sum_{j=1}^N b_j x_j - \lambda \sum_{j=1}^N b_j x_j^* = \lambda \hat{\alpha}_S - \lambda \hat{\alpha}_S = 0,$$

para toda $\mathbf{x} \in C$ ($\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$). Aplicando el Teorema 4.7 se concluye que \mathbf{x}^* es el mínimo.

Paso II. Si alguna componente de \mathbf{x}^* es negativa, entonces se debe redefinir la proyección. Sin pérdida de generalidad, supongamos que $x_j^* \leq 0$ para $j = l+1 \dots N$ (no todas las componentes pueden ser negativas o cero ya que $\hat{\alpha}_S > 0$). Se definen $x_j^{**} = 0$ para $j = l+1 \dots N$, y las restantes variables se toman de la nueva proyección con H y C restringidos, es decir,

$$x_j^{**} = x_j^0 - \frac{\eta}{2} b_j, \quad j = 1..l, \quad (6.24)$$

y

$$\frac{\eta}{2} = \frac{\sum_{i=1}^l b_i x_i^0 - \hat{\alpha}_S}{\sum_{i=1}^l b_i^2}, \quad (6.25)$$

de esta forma se satisface que $\sum_{j=1}^N b_j x_j^{**} = \hat{\alpha}_S$.

Si $x_j^{**} \geq 0$ para $j = 1..l$, entonces $\mathbf{x}^{**} \in C$ y

$$-\nabla H(\mathbf{x}^{**}) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}^{**}) = 2 \sum_{i=l+1}^N x_i \left(x_i^0 - \frac{\eta}{2} b_i \right), \quad \mathbf{x} \in C, \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*.$$

Después de observar que $\sum_{i=1}^l b_i x_i^* > \hat{\alpha}_S$, se deduce usando (6.22) la siguiente relación:

$$-\frac{\eta}{2} < -\frac{\lambda}{2}.$$

Con esta desigualdad y (6.22) se concluye que

$$-\nabla H(\mathbf{x}^{**}) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}^{**}) \leq 2 \sum_{i=l+1}^N x_i x_i^* \leq 0,$$

para toda $\mathbf{x} \in C$ ($\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$). Aplicando el Teorema 4.7 se concluye que \mathbf{x}^{**} es el mínimo.

Este algoritmo que calcula proyecciones ortogonales en forma sucesiva es finito, es decir, a lo más se deben realizar N proyecciones para calcular exactamente el mínimo buscado (la última proyección siempre da una variable positiva ya que $\hat{\alpha}_S > 0$).

Esta estrategia de control óptimo requiere las soluciones de los modelos diferenciales (6.2)-(6.10) y (6.12)-(6.19), lo cual es equivalente a resolver cuatro problemas diferenciales del tipo (2.1)-(2.5); y de acuerdo a lo desarrollado en el Capítulo 5, es posible realizar esto en forma eficiente con el esquema de solución numérica de separación de operadores componente por componente. Además, por el Teorema 4.8, el algoritmo de proyecciones ortogonales sucesivas, que define las tasas óptimas, resulta ser computacionalmente económico. Estas características determinan que el control es posible, en un tiempo breve, luego de un pronóstico desfavorable.

6.3. Control para sustancias primarias y secundarias

En algunos casos, tanto el contaminante primario como la especie secundaria resultan ser sustancias tóxicas que se deben controlar, este es el caso del SO_2 y el H_2SO_4 , los cuales forman una mezcla sumamente irritante.

En una situación de este tipo, se deben considerar los diferentes casos del pronóstico que se obtiene para la concentración promedio de los contaminantes primario y secundario. Ambos pronósticos se pueden calcular al resolver el modelo diferencial (6.1)-(6.9), y estimar $\mathbf{J}_{\Omega, \tau}$ y $\mathbf{J}_{\Omega, \tau}^S$ por (2.17) y (6.20), respectivamente.

Se observan los siguientes casos considerando que $\hat{\alpha} > 0$ y $\hat{\alpha}_S > 0$.

1. Si $J_{\Omega,\tau} \leq J_0$ y $J_{\Omega,\tau}^S \leq J_0^S$, entonces no hay necesidad de realizar control, y las fuentes industriales pueden trabajar con las tasas acostumbradas.
2. Si $J_{\Omega,\tau} > J_0$ y $J_{\Omega,\tau}^S \leq J_0^S$, entonces sólo se aplica control para el contaminante primario, es decir, se reducen las tasas de emisión por control óptimo para satisfacer la norma de calidad del aire primaria. Es importante notar que, ya que todas las fuentes industriales reducen su actividad, entonces se satisface también la norma de calidad del aire secundaria.
3. Si $J_{\Omega,\tau} \leq J_0$ y $J_{\Omega,\tau}^S > J_0^S$, entonces sólo se aplica control óptimo para el contaminante secundario con el fin de lograr que $J_{\Omega,\tau}^S \leq J_0^S$; y nuevamente, se satisface también la norma primaria.
4. Si $J_{\Omega,\tau} > J_0$ y $J_{\Omega,\tau}^S > J_0^S$, entonces se debe aplicar control óptimo para ambos contaminantes.

Sean

$$Q_i^p(t) = \beta_i^p Q_i(t), \quad i = 1 \dots N,$$

las tasas óptimas definidas para el control primario, y

$$Q_i^s(t) = \beta_i^s Q_i(t), \quad i = 1 \dots N,$$

las tasas óptimas definidas para el control secundario.

Se definan los nuevos parámetros de amortiguamiento como

$$\beta_i^* = \min \{ \beta_i^p, \beta_i^s \}, \quad i = 1 \dots N.$$

De esta forma, las tasas de emisión dadas por

$$Q_i^*(t) = \beta_i^* Q_i(t), \quad i = 1..N, \quad 0 \leq t \leq T,$$

satisfacen ambas normas de calidad del aire, es decir, $J_{\Omega,\tau} \leq J_0$ y $J_{\Omega,\tau}^S \leq J_0^S$.

Si por el contrario, se tiene que $\hat{\alpha} \leq 0$ ó $\hat{\alpha}_S \leq 0$, entonces todas las fuentes contaminantes deben parar actividades, es decir, se toman las tasas de emisión como

$$Q_i^*(t) = 0, \quad i = 1 \dots N, \quad 0 \leq t \leq T,$$

y aun de esta forma, es posible que se pueda violar alguna de las normas sanitarias ($\hat{\alpha} < 0$ ó $\hat{\alpha}_S < 0$).

Esta elección parece muy restrictiva, sin embargo, se debe recordar que sólo se aplica durante el tiempo con condiciones atmosféricas adversas (que impiden una adecuada dispersión).

Conclusiones

En este trabajo se han formulado modelos matemáticos de dispersión de sustancias contaminantes en la atmósfera, y los correspondientes modelos adjuntos, los cuales, junto con su versión numérica, no sólo presentan buenas características matemáticas como son existencia, unicidad y estabilidad de las soluciones, sino también un adecuado comportamiento físico, ya que satisfacen la ecuación de balance de masa.

Estos modelos permiten realizar estimaciones duales (directas y adjuntas) de la concentración promedio de un contaminante (primario o secundario) en una región de importancia ecológica. Con esta información, y con la solución de los modelos adjuntos, se han formulado estrategias de control, a corto plazo, para las tasas de emisión de las fuentes industriales. Una vez que el modelo de dispersión ha realizado un pronóstico desfavorable con las tasas de emisión usuales de las fuentes puntuales, estas estrategias de control construyen nuevas tasas de emisión (controles) que permiten mantener la concentración promedio de las sustancias, primarias o secundarias, por debajo de las normas sanitarias correspondientes.

En el desarrollo de estas estrategias de control se establecieron parámetros ($\hat{\alpha}$ y $\hat{\alpha}_S$) que indican si es o no posible el control adecuado de las sustancias contaminantes, y que a su vez, caracterizan el espacio de soluciones para el problema de control. Destaca en estos parámetros su dependencia con la norma sanitaria de la sustancia por controlar, y con la distribución inicial de las especies contaminantes. Esta relación indica la necesidad de conocer correctamente el estado inicial de los contaminantes atmosféricos para poder definir la solución del problema de control, y por lo tanto, se demuestra la importancia de una adecuada red de monitoreo atmosférico que proporcione dichos datos iniciales, con el fin de atender correctamente el problema de control a corto plazo.

Se concluye también que, el control de un contaminante primario no implica el control de una sustancia secundaria (y viceversa), ya que las normas sanitarias respectivas, los coeficientes de reactividad y la distribución inicial de dichas especies, en general, son diferentes. Por lo tanto, como se demostró en la sección 6.3, es necesario realizar control para cada sustancia y hacer compatibles las tasas definidas.

Es importante destacar que, el control a largo plazo de sustancias contaminantes no implica necesariamente el control de corto plazo. Esto indica

que las estrategias de control, como las desarrolladas en este trabajo, deben ser parte de una política general de control de emisiones que complementa los aspectos de corto y largo plazo.

En este trabajo se presentan tres estrategias de control, y con éstas, una técnica para generar una gran cantidad de controles (control convexo), todos ellos matemáticamente correctos. Esta diversidad representa una ventaja para las industrias, ya que les permite elegir su forma de operación entre los posibles controles.

Entre las estrategias que se presentan destaca el *control óptimo*, ya que ofrece tasas de emisión que están lo más cerca posible, tanto cualitativa como cuantitativamente, a las tasas originales. Esto también representa una ventaja para las industrias, ya que la restricción se caracteriza por la disminución en un porcentaje del ritmo de trabajo ($1 - \beta_i^*$) y no por la modificación total de la forma de operar.

Otra característica relevante en el *control óptimo* es su gran velocidad para determinar las tasas de emisión con que deben operar las industrias (Teorema 4.8), lo cual es un requisito indispensable en el control de corto plazo.

Todas las estrategias de control que se han presentado tienen como base un modelo bidimensional de dispersión. Dicho modelo se justifica para eventos de gran estabilidad atmosférica, que es cuando comúnmente se debe realizar el control de las emisiones industriales. Sin embargo, es importante observar que la dimensión del modelo de dispersión no debe considerarse como una limitante de las ideas expuestas sobre control, ya que la extensión de todas las estrategias es inmediata para un modelo lineal tridimensional, que satisface condiciones de frontera generalizadas con respecto a las usadas en este trabajo. Un modelo de este tipo ya está desarrollado, y se presenta, junto con el principio de dualidad correspondiente, en [39] y [41].

Finalmente, se debe observar que, establecer políticas de control de emisiones para los diferentes contaminantes atmosféricos, a corto o largo plazo, resulta ser un problema sumamente complejo debido al gran número de variables que están involucradas (meteorológicas, de reactividad, del inventario de emisiones, del monitoreo atmosférico, de cooperación de las industrias, de metas económicas y ecológicas, etc.). Por esta razón, los modelos matemáticos que integran esta información, en forma parcial o total, aun cuando generan políticas óptimas, no son totalmente acertados^[6,15], y sólo deben ser considerados como una guía o un indicador para establecer las políticas reales de control. Esta conclusión es válida aun para grandes modelos integrados

de estimación, como el IIASA RAINS^[6], el cual ha sido destinado, en años recientes, para desarrollar políticas de control de SO_2 y NO_x en Europa. Sin embargo, no se debe olvidar que, aun con las limitaciones que pueden tener los modelos de control, éstos nos permiten hacer proyecciones y disponer de alternativas para la toma de decisiones, lo cual resulta ser de un gran valor si se considera que la ausencia de un pronóstico temprano y la falta de una adecuada limitación de las emisiones ya han provocado eventos de gran impacto en la población, como los que se presentaron en Londres en diciembre de 1952, enero de 1956, y diciembre de 1957^[4], los cuales fueron eventos de corto plazo (cinco días), caracterizados por bajas temperaturas e inversiones térmicas, que provocaron un gran incremento en los decesos por la presencia de SO_2 y partículas.

Referencias

- [1] Achieser, N. I., *Theory of Approximation*. Dover Publications, Inc., New York, 306 pp, 1992.
- [2] Beilke, S. and A. J. Elshout, *Acid Deposition*. Proceedings of the CEC workshop, D. Reidel Publishing Company, 1983.
- [3] Bravo, A. H., R. Sosa y R. Torres, Ozono y lluvia ácida en la Ciudad de México. *Ciencias*, No. 22, 1991.
- [4] Caselli, M., *La contaminación atmosférica*. Siglo Veintiuno, México, 190 pp, 1996.
- [5] Cheney, E. W., *Introduction to approximation theory*. Chelsea Publishing Company, New York, 1966.
- [6] Cocks, A. T. and I. R. Rodgers, The Limitations of integrated assessment modelling in developing air pollution control policies. *Environmental Pollution*, 102, S1, 653-639, 1998.
- [7] Crank, J., and P. Nicolson, A practical method for numerical evaluation of solutions of Partial Differential Equations of the heat conduction type. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 43, 50-67, 1947.
- [8] Davidova, B., Y. N. Skiba, A. Martinez y S. N. Bulgakov, Modelación matemática de los niveles de contaminación en la Cd. de Guadalajara, Jal., México. Parte II: Modelo numérico de transporte de contaminantes y su adjunto. *Rev. Int. Contam. Ambient.*, 17, 2, 2001.
- [9] Doménech, X., *Química de la contaminación*. Miraguano Ediciones, España, 158 pp, 1999.
- [10] Flagan, R. C. and J.H. Seinfeld, *Fundamentals of air pollution engineering*. Prentice-Hall, 1988.
- [11] Françoise Le Dimet, *Optimal control in Meteorology: Applications to limited area problems*. Universite Blaise Pascal (France). Technical Report, 1990.
- [12] Glowinski, R. and J. L. Lions, Exact and approximate controllability for distributed parameter systems. *Acta Numerica*, 269-378, 1994.
- [13] Golub H. and C. F. Van Loan, *Matrix Computations*. Johns Hopkins University Press, 1996.
- [14] Hadamard, J., *Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations*. Dover Publications, Inc. 316 pp, 1923.

- [15] Jhih- Shyang, S., An Optimization model for photochemical air pollution control. *Eur. J. of Oper. Res.*, 106, 1-14, 1998.
- [16] Karamchandani P., A. Koo and C. Seigneur, Reduced gas-phase kinetic mechanism for atmospheric plume chemistry. *Environ. Sci. Technol.*, 32, 1709-1720, 1998.
- [17] Kawada, J., Health effects of air pollutants and their management. *Atmos. Environm.*, Vol. 18, No. 3, 613-620, 1984.
- [18] Luenberger, G. D., *Linear and nonlinear programming*. Addison-Wesley, E.U.A., 500 pp, 1989.
- [19] Marchuk, G. I., *Mathematical models in environmental problems*. Elsevier, New York, 1986.
- [20] Marchuk, G. I., Mathematical Issues of Industrial Effluent Optimization. *J. Meter. Soc. Japan*, 60, 481-485, 1982.
- [21] Marchuk, G. I. and Yu. N. Skiba, Numerical Calculation of the Conjugate Problem for a Model of the Thermal Interaction of the Atmosphere with the Ocean and Continents. *Izvestiya, Atmos. Ocean. Physics*, 12, 279-284, 1976.
- [22] Marchuk, G. I., *Methods of numerical mathematics*. Springer-Verlag, NY, 1975.
- [23] Marchuk, G. I., Formulation of the theory of perturbations for complicated models. Part I: The estimation of the climate change. *Geofis. Int.*, 15, 103-156, 1975.
- [24] Marchuk, G. I., The numerical solution of problems of atmospheric and oceanic dynamics. *Gidrometeoizdat*, Leningrad, 304 pp, 1974.
- [25] Panos, G. and Seinfeld J. H., Mathematical Modeling of Turbulent Reacting Plumes I: General Theory and Model Formulation. *Atmospheric Environment*, Vol 20, No 9, 1791-1807, 1986.
- [26] Parra-Guevara, D. y Yuri N. Skiba, Optimización de emisiones industriales para la protección de zonas ecológicas. *Atmósfera*, Vol 13, Num 1, pp 27-38, 2000.
- [27] Parra-Guevara, D. and Yuri N. Skiba, Industrial pollution transport. Part II: Control of industrial emissions. *Env. Modeling and Assessment*, Baltzer, Vol 5, No. 3, pp 177-184, 2000.
- [28] Penenko, V. V. and Raputa, V. F., Some models for optimizing the operation of the atmospheric-pollution sources. *Sov. Meteorol. Hidrology*, 2, 46-54, 1983.

- [29] *Programa para mejorar la calidad del aire en el Valle de México 1995-2000*. Departamento del Distrito Federal. Gobierno del Estado de México. SEMARNAP. Secretaria de Salud. México D.F., 1997.
- [30] Reed, M. and B. Simon, *Functional Analysis I*. Academic Press, Inc. (London) LTD, 1980.
- [31] Rivera, A. M., *El cambio climático*. Tercer Milenio (CONACULTA), México, 63 pp, 1999.
- [32] Rodhe H., P. Crutzen and A. Vanderpol, Formation of sulfuric and nitric acid in the atmosphere during long-range transport. *Tellus*, 33, 132-141, 1981.
- [33] Rossin, A. D. and J. J. Roberts, Episode control criteria and strategy for carbone monoxide. *J. of the air Pollution Control Association*, Vol 22, No. 4, 1971.
- [34] Seinfeld, J. H., *Atmospheric chemistry and physics of air pollution*. Wiley, NY, 1992.
- [35] Seinfeld, J. H., *Ozone air quality models. A critical review*. JAPCA, 38 (5), 616-645. 1988.
- [36] Shir, C. C. and L. J. Shieh, A generalized urban air pollution model and its applications to the study of SO_2 distributions in the St. Louis metropolitan area. *Journal of Applied Meteorology*, Vol 13, No 2, 1974.
- [37] Skiba Yu. N. , *Introducción a los métodos numéricos*. DGP y FE, UNAM, México, 321 pp, 2001.
- [38] Skiba Yu. N. and Parra-Guevara D., Industrial pollution transport. Part I: Formulation of the problem and air pollution estimates. *Env. Modeling and Assessment*, Baltzer, Vol 5, No. 3, pp 169-175, 2000.
- [39] Skiba, Yu. N., Air Pollution Estimates. *World Resource Review*. Vol. 9, No. 4, 542-556, 1997.
- [40] Skiba, Yu. N. and J. Adem, A balanced and absolutely stable numerical thermodynamic model for closed and open oceanic basins. *Geofísica Internacional*, Vol. 34, Num. 4, 1995.
- [41] Skiba, Yu. N., Balanced and absolutely stable implicit schemes for the main and the adjoint pollutant transport equations in the limited area. *Rev. Int. Contam. Ambient.*, 9, 39-51, 1993.
- [42] Skiba, Yu. N. *Method of solving the atmosphere-ocean-soil thermal interaction problem on a basis of the adjoint equations*. Ph. D. Thesis,

Computing Center, The USSR Academy of Sciences, Novosibirsk, 124 pp. 1978.

[43] Vladimirov, V. S. and G.I. Marchuk, A Definition of an Adjoint Operator for Nonlinear Problems. *Doklady Mathematics*, Vol. 61, No. 3, 438-441, 2000.

[44] Wales, S. M., *Modeling with differential equations in chemical engineering*. Butterworth-Heinemann, 1998.

[45] Wark, K. and Warner C. F., *Air Pollution, its Origin and Control*. Harper & Row, 1999.

[46] Watson, G. A., *Approximation Theory and Numerical Methods*. John Wiley and Sons, 230 pp, 1980.

[47] Zanneti, P., *Air pollution modelling*. CMP, New York, EU, 1990.

[48] Zundel, T. and O. Rentz, Control techniques and strategies for regional air pollution control from energy and industrial sectors. *Water, Air and Soil Pollution*, Vol 85, 213-224, 1995.

Apéndice

Se desarrollaron programas de cómputo para aplicar el esquema de solución numérica (5.11), simétrico y de orden dos, a los modelos diferenciales (2.1)-(2.5) y (3.2)-(3.5) descritos respectivamente en los Capítulos 2 y 3. El lenguaje que se usó fue el de MATLAB, que es un lenguaje de cuarto nivel.

MATLAB es un ambiente de computación técnica que combina cálculos numéricos, graficación avanzada y visualización, y un lenguaje de programación de alto nivel. El nombre MATLAB significa *matrix laboratory* y fue originalmente creado para dar un fácil acceso al software de algebra lineal numérica desarrollado por los proyectos LINPACK y EISPACK, los cuales representan el estado del arte del software en este campo.

Las características más importantes de MATLAB por las que se eligió para aplicarlo al problema de control de emisiones industriales son:

- (1) Continuidad entre el tipo de datos. Esto significa que no hay conflicto entre la combinación de datos enteros, reales y complejos. De forma interna todos los datos se manejan como reales en doble precisión, lo cual hace más exactos todos los cálculos.
- (2) Mayor amplitud del intervalo de números de punto flotante. Esto significa que el intervalo de números positivos $[x_{\min}, x_{\max}]$ que pueden usarse en los cálculos es mayor. En una PC- Pentium II (HP) el intervalo es $[4.5e - 324, 9.9e + 307]$.
- (3) Amplia biblioteca matemática. MATLAB contiene más de 500 funciones matemáticas cuyos argumentos pueden ser arreglos.
- (4) Herramientas integradas de graficación y visualización de datos .
- (5) Transportabilidad de los programas y vinculación con los lenguajes C y FORTRAN. Esto significa que los programas desarrollados son independientes de la plataforma de hardware, además de que es posible establecer comunicación entre MATLAB y rutinas de C o FORTRAN.

Los siguientes listados son los programas en MATLAB para resolver los modelos de dispersión y su adjunto con el esquema numérico (5.11) descrito en el Capítulo 5. Estos programas permiten hacer las estimaciones, directa y adjunta, del valor promedio del contaminante en zonas de importancia ecológica, y al mismo tiempo, construyen las tasas de emisión adecuadas (estrategias de control) a fin de lograr

$$J_{\Omega, \tau}^S(\phi) \leq J_0^S.$$

```

#####
% PROGRAMA PRINCIPAL ADJ2D
% Resuelve el modelo adjunto por separación de operadores,
% y construye las tasas de emisión con las estrategias de
% control
% Parametros de discretización:
%         n=divisiones en X
%         m=divisiones en Y
%         tao=paso en tiempo
%         nt=numero par de niveles de tiempo por simular
#####
%Parámetros del modelo
sig=0.36;
miu=1.8;
norsan=210;
delta1=5200;
delta2=3500;
gam1=delta1/(delta1+delta2);
gam2=delta2/(delta1+delta2);

%Región de estudio D=[0,Xmax]x[0,Ymax]
Xmax=3.0;
Ymax=3.0;

%Coordenadas del sitio de emisión
px1=1.5;
py1=0.2;
px2=0.6;
py2=2.0;

%Región de importancia ecológica
%Omega=(Omxmin,Omxmax)x[Omymin,Omymax]
Omxmin=1.0;
Omxmax=2.0;
Omymin=1.0;
Omymax=2.0;
area=(Omxmax-Omxmin)*(Omymax-Omymin);

%Intervalo de tiempo [0,eta] donde actua el
%forzamiento, y contador final
T=tao*nt;
eta=T;
kfin=round(eta/tao);

%Tiempo de cómputo
t0=cputime;

%Definición de la malla en la región D
dx=Xmax/n;
dy=Ymax/m;
x=linspace(dx/2,Xmax-(dx/2),n);
y=linspace(dy/2,Ymax-(dy/2),m);

%Coordenadas enteras del sitio de emisión
lx1=round(px1/dx + 0.5);
ly1=round(py1/dy + 0.5);
lx2=round(px2/dx + 0.5);
ly2=round(py2/dy + 0.5);

%Coordenadas enteras de la región Omega
iini=round(Omxmin/dx + 1);
ifin=round(Omxmax/dx);
jini=round(Omymin/dy + 1);
jfin=round(Omymax/dy);

%Concentración inicial del contaminante, y memoria

```

```

%Estimación de la concentración promedio del
%contaminante en Omega al tiempo cero
k=0;
ro=zeros(1,nt+1);
if kinf==k
    ro(1)=integra(C,iini,ifin,jini,jfin,dx,dy);
end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Solución por separación de operadores
%
bqt=round(nt/2);
for kk=1:bqt
    %
    for j=1:m
        sepx;
    end

    k=2*kk-1;

    for i=1:n
        sepy;
    end

    if k>=kinf
        ro(k+1)=integra(C,iini,ifin,jini,jfin,dx,dy);
    end
%
    k=2*kk;

    for i=1:n
        sepy;
    end

    for j=1:m
        sepx;
    end

    if k>=kinf
        ro(k+1)=integra(C,iini,ifin,jini,jfin,dx,dy);
    end
end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Cálculo de la concentración promedio del contaminante
%en la región de importancia ecológica Omega
ro=2*ro;
ro(kinf+1)=ro(kinf+1)/2;
ro(nt+1)=ro(nt+1)/2;
conpro=sum(ro);
conpro=conpro*tao/(2*eta*area);
%Resultados numéricos de tiempo de cómputo y concentración promedio
disp('Tiempo de cómputo en segundos:'),disp(cputime-t0)
disp('Concentración promedio del contaminante en Omega:')
disp(conpro)
%Procesamiento de imagenes
cs=contour(x,y,C',100);xlabel('x (km)');ylabel('y (km)');...
    title('Concentración de dióxido de azufre (T= (hr)'),disp(T);
clabel(cs,'manual')
pause;
surf(x,y,C'),xlabel('x (km)'),ylabel('y (km)'),...
    zlabel('Concentración de dióxido de azufre (miugr/m3)')
pause;
pcolor(x,y,C'),xlabel('x (km)'),ylabel('y (km)'),...
    title('Distribución de dióxido de azufre')
%FIN de TCONT

```

```

#####
% PROGRAMA PRINCIPAL TCONT
% Resuelve el modelo de dispersión por separación de operadores,
% y estima la concentración promedio del contaminante en Omega
% Parámetros de discretización:
% n=divisiones en X
% m=divisiones en Y
% tao=paso en tiempo
% nt=número par de niveles de tiempo por simular
#####
%Parámetros del modelo
sig=0.0;
miu=0.8;

%Región de estudio D=[0,Xmax]x[0,Ymax]
Xmax=4.0;
Ymax=4.0;

%Coordenadas del sitio de emisión
px1=1.5;
py1=1.6;
px2=1.0;
py2=1.6;

%Región de importancia ecológica
%Omega=[Omxmin,Omxmax]x[Omymin,Omymax]
Omxmin=0.0;
Omxmax=4.0;
Omymin=0.0;
Omymax=4.0;
area=(Omxmax-Omxmin)*(Omymax-Omymin);

%Intervalo de tiempo [T-eta,T] para calcular la concentración
%promedio del contaminante en Omega, y contador inicial
T=tao*nt;
eta=T;
kinf=round((T-eta)/tao);

%Tiempo de cómputo
t0=cputime;

%Definición de la malla en la región D
dx=Xmax/n;
dy=Ymax/m;
x=linspace(dx/2,Xmax-(dx/2),n);
y=linspace(dy/2,Ymax-(dy/2),m);

%Coordenadas enteras del sitio de emisión
lx1=round(px1/dx + 0.5);
ly1=round(py1/dy + 0.5);
lx2=round(px2/dx + 0.5);
ly2=round(py2/dy + 0.5);

%Coordenadas enteras de la región Omega
iini=round(Omxmin/dx + 1);
ifin=round(Omxmax/dx);
jini=round(Omymin/dy + 1);
jfin=round(Omymax/dy);

%Concentración inicial del contaminante
for i=1:n
    for j=1:m
        C(i,j)=conini(x(i),y(j));
    end
end
end

```

```

%para la solución adjunta en el sitio de emisión
C=zeros(n,m);
g1=zeros(1,nt);
g2=zeros(1,nt);
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Solución por separación de operadores
%
bqt=round(nt/2);
for kk=1:bqt
    %
    k=2*kk-1;

    for j=1:m
        sepx;
    end

    for i=1:n
        sepy;
    end

    g1(nt-(k-1))=C(lx1,ly1);
    g2(nt-(k-1))=C(lx2,ly2);
    %
    k=2*kk;

    for i=1:n
        sepy;
    end

    for j=1:m
        sepx;
    end

    g1(nt-(k-1))=C(lx1,ly1);
    g2(nt-(k-1))=C(lx2,ly2);

end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Impacto de la distribución inicial, y parámetro Alfa
s=0;
for i=1:n
    for j=1:m
        s=s+conini(x(i),y(j))*C(i,j);
    end
end
s=dx*dy*s;
cdi=s;
disp('impacto de la condición inicial:'),disp(cdi)
%Alfa
norsan=norsan-cdi;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Primera estrategia de control
s=0;
for k=2:nt
    s=s + 2*((g1(k))^2);
end
s=(tao/2)*((g1(1))^2 + s);
Q11=gam1*(norsan/s)*g1;
Q11(nt+1)=0.0;
Q11=min(Q11,delta1);
vdt=linspace(0,T,nt+1);
plot(vdt,Q11),xlabel('T (hr)'),ylabel('TASA DE EMISION (kg/hr)'),...
    title('PRIMERA ESTRATEGIA DE CONTROL Q11'),grid
pause;
s=0;

```

```

for k=2:nt
    s=s + 2*((g2(k))^2);
end
s=(tao/2)*((g2(1))^2 + s);
Q12=gam2*(norsan/s)*g2;
Q12(nt+1)=0.0;
Q12=min(Q12,delta2);
vdt=linspace(0,T,nt+1);
plot(vdt,Q12),xlabel('T (hr)'),ylabel('TASA DE EMISION (kg/hr)'),...
    title('PRIMERA ESTRATEGIA DE CONTROL Q12'),grid
pause;

%Concentración promedio con Q11 , Q12, y cdi
conpro=0;
s=0;
for k=2:nt
    s=s + 2*g1(k)*Q11(k);
end
s= s + g1(1)*Q11(1);
conpro=tao*s/2;
s=0;
for k=2:nt
    s=s + 2*g2(k)*Q12(k);
end
s= s + g2(1)*Q12(1);
conpro=conpro+(tao*s/2)+cdi;
disp('Concentración promedio en Omega usando Q11 y Q12:')
disp(conpro)

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Segunda estrategia de control
I=0;
for k=2:nt
    if g1(k)>=0.001
        I=I+1;
    end
end
I=I*tao + tao/2;
for k=1:nt
    if g1(k)>=0.001
        Q21(k)=min(norsan/(I*g1(k)),delta1);
    else
        Q21(k)=delta1;
    end
end
Q21(nt+1)=delta1;
Q21=gam1*Q21;
plot(vdt,Q21),xlabel('T (hr)'),ylabel('TASA DE EMISION (kg/hr)'),...
    title('SEGUNDA ESTRATEGIA DE CONTROL Q21'),grid
pause;
I=0;
for k=2:nt
    if g2(k)>=0.001
        I=I+1;
    end
end
I=I*tao + tao/2;
%
for k=1:nt
    if g2(k)>=0.001
        Q22(k)=min(norsan/(I*g2(k)),delta2);
    else
        Q22(k)=delta2;
    end
end
Q22(nt+1)=delta2;

```

```

Q22=gam2*Q22;
plot(vdt,Q22),xlabel('T (hr)'),ylabel('TASA DE EMISION (kg/hr)'),...
    title('SEGUNDA ESTRATEGIA DE CONTROL Q22'),grid
pause;

%Concentración promedio con Q21, Q22, y cdi
conpro=0;
s=0;
for k=2:nt
    s=s + 2*g1(k)*Q21(k);
end
s=s + g1(1)*Q21(1);
conpro=tao*s/2;
s=0;
for k=2:nt
    s=s + 2*g2(k)*Q22(k);
end
s=s + g2(1)*Q22(1);
conpro=conpro+(tao*s/2)+ cdi;
disp('Concentración promedio en Omega usando Q21 y Q22:')
disp(conpro)

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Tercera estrategia de control
s=0;
for k=2:nt
    s=s + 2*g1(k)*tasal((k-1)*tao);
end
s=s + g1(1)*tasal(0);
a1=tao*s/2;
s=0;
for k=2:nt
    s=s + 2*g2(k)*tasa2((k-1)*tao);
end
s=s + g2(1)*tasa2(0);
a2=tao*s/2;
s=0;
for k=1:nt-1
    s=s + 2*((tasal(k*tao))^2);
end
n31=(tao/2)*(s+ (tasal(0))^2+(tasal(T))^2);
s=0;
for k=1:nt-1
    s=s + 2*((tasa2(k*tao))^2);
end
n32=(tao/2)*(s+ (tasa2(0))^2+(tasa2(T))^2);
lamda=(a1+a2-norsan)/((a1^2/n31) + (a2^2/n32));
beta1=1.0-lamda*( a1 / n31);
beta2=1.0-lamda*( a2 / n32);
for k=1:nt+1
    q1(k)=tasal((k-1)*tao);
end
for k=1:nt+1
    q2(k)=tasa2((k-1)*tao);
end
Q31=beta1*q1;
Q32=beta2*q2;
plot(vdt,q1,vdt,Q31),xlabel('T (hr)'),...
    ylabel('TASA DE EMISION (kg/hr)'),...
    title('TERCERA ESTRATEGIA DE CONTROL Q31'),grid
pause;
plot(vdt,q2,vdt,Q32),xlabel('T (hr)'),...
    ylabel('TASA DE EMISION (kg/hr)'),...
    title('TERCERA ESTRATEGIA DE CONTROL Q32'),grid
pause;

```

```

%Concentración promedio con Q31, Q32, y cdi
s=0;
for k=2:nt
    s=s + 2*g1(k)*Q31(k);
end
s=s + g1(1)*Q31(1);
conpro=tao*s/2;
s=0;
for k=2:nt
    s=s + 2*g2(k)*Q32(k);
end
s=s + g2(1)*Q32(1);
conpro=conpro+(tao*s/2)+cdi;
disp('Concentración promedio en Omega usando Q31 y Q32:')
disp(conpro)

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Tiempo de cómputo y concentración promedio con las tasas originales
conpro=0;
s=0;
for k=2:nt
    s=s + 2*g1(k)*tasal((k-1)*tao);
end
s=s + g1(1)*tasal(0);
conpro=tao*s/2;
%
s=0;
for k=2:nt
    s=s + 2*g2(k)*tasa2((k-1)*tao);
end
s=s + g2(1)*tasa2(0);

conpro=conpro+(tao*s/2)+cdi;
disp('Tiempo de cómputo en segundos:'),disp(cputime-t0)
disp('Concentración promedio del contaminante en Omega:')
disp(conpro)

%Procesamiento de imagenes
cs=contour(x,y,C',50);xlabel('X (km)');ylabel('Y (km)');...
    title('Contornos de nivel para la adjunta en t=0');
clabel(cs,'manual')
pause;
surf(x,y,C'),xlabel('x (km)'),ylabel('y (km)'),...
    zlabel('Solución adjunta en t=0')
pause;
pcolor(x,y,C'),xlabel('x (km)'),ylabel('y (km)'),...
    title('Vista aerea de la adjunta en t=0')
%FIN de ADJ2D

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% SUBROUTINA SEPX
% Resuelve el problema unidimensional en X
% Usa los datos de discretización globales
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Cálculo de las condiciones de frontera
u=velx(0,y(j));
if u<=0
    alf=1;
else
    alf=(miu/dx - u/2)/(miu/dx + u/2);
end
u=velx(Xmax,y(j));
if u>=0
    bet=1;
else
    bet=(miu/dx + u/2)/(miu/dx - u/2);

```

```

end

%Cálculo de los coeficientes de la matriz
%en el problema semidiscreto
for i=1:n
    ax(i)=-miu/(dx^2) - velx(x(i)-(dx/2),y(j))/(2*dx);
    bx(i)=sig/2 + 2*miu/(dx^2);
    cx(i)=-miu/(dx^2) + velx(x(i)+(dx/2),y(j))/(2*dx);
end
bx(1)=bx(1)+alf*ax(1);
bx(n)=bx(n)+bet*cx(n);

%Construcción de la matriz tridiagonal
%para el problema semidiscreto
ax=ax';
bx=bx';
cx=cx';
Ax=spdiags([cx bx ax],[-1,0,1],n,n)';

%Solución del problema semidiscreto
%con el esquema de Crank-Nicolson
Ax=(tao/2)*Ax;
bx=C(:,j);
bx=bx-Ax*bx;
for i=1:n
    Ax(i,i)=1+Ax(i,i);
end
ax=Ax\bx;

%Almacenar la solución de la nueva concentración
C(:,j)=ax;

%Limpieza de memoria
clear ax;
clear bx;
clear cx;
clear Ax;
%FIN de SEPX

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% SUBROUTINA SEPY
% Resuelve el problema unidimensional en Y
% Usa los datos de discretización globales
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%Cálculo de las condiciones de frontera
v=vely(x(i),0);
if v<=0
    alf=1;
else
    alf=(miu/dy - v/2)/(miu/dy + v/2);
end
v=vely(x(i),Ymax);
if v>=0
    bet=1;
else
    bet=(miu/dy + v/2)/(miu/dy - v/2);
end

%Cálculo de los coeficientes de la matriz
%en el problema semidiscreto
for j=1:m
    ay(j)=-miu/(dy^2) - vely(x(i),y(j)-(dy/2))/(2*dy);
    by(j)=sig/2 + 2*miu/(dy^2);
    cy(j)=-miu/(dy^2) + vely(x(i),y(j)+(dy/2))/(2*dy);
end

```

```

by(1)=by(1)+alf*ay(1);
by(m)=by(m)+bet*cy(m);

%Construcción de la matriz tridiagonal
%para el problema semidiscreto
ay=ay';
by=by';
cy=cy';
Ay=spdiags([cy,by,ay],[-1,0,1],m,m)';

%Solución del problema semidiscreto
%con el esquema de Crank-Nicolson
Ay=(tao/2)*Ay;
by=C(i,:);
by=by';
by=by-Ay*by;
%
if i==lx1
    by(ly1)=by(ly1) + tao*tasal(k*tao-(tao/2))/(dx*dy);
end
if i==lx2
    by(ly2)=by(ly2) + tao*tasa2(k*tao-(tao/2))/(dx*dy);
end
%
for j=1:m
    Ay(j,j)=1+Ay(j,j);
end
ay=Ay\by;

%Almacenar la solución de la nueva concentración
C(i,:)=ay';

%Limpieza de memoria
clear ay;
clear by;
clear cy;
clear Ay;
%FIN de SEPY

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% FUNCIONES AUXILIARES %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function S=integra(C,iini,ifin,jini,jfin,dx,dy)
%Aproximación de la integral doble sobre
%la región de importancia ecológica Omega
S=0;
for l=iini:ifin
    for ll=jini:jfin
        S=S+C(l,ll);
    end
end
S=dx*dy*S;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function ci=conini(xi,yj)
%Función escalar que determina la concentración
%inicial del contaminante en la región D
%ci=0.0000036*exp(-(xi-0.5)^2-(yj-0.5)^2);
%ci=175*exp(-(xi-1.5)^2-(yj-0.2)^2)+125*exp(-(xi-0.6)^2-(yj-2.0)^2);
ci=0.0;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function ql=tasal(tk)
%Tasa de emisión del contaminante
%ql=10/(1+(tk)^2);

```

```

%q1=0.0000036;
%q1=0.0;
%q1=3.8;
%q1=4.0;
if (tk>=0.0 & tk<0.5)
    q1=10000.0*tk;
end
if (tk>=0.5 & tk<=7.0)
    q1=5000.0;
end
if (tk>7.0 & tk<=8.0)
    q1=5000.0-5000.0*(tk-7.0);
end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function q2=tasa2(tk)
%Tasa de emisión del contaminante
%q2=10/(1+(tk)^2);
%q2=0.0000036;
%q2=1.5;
%q2=3.8;
%q2=4.0;
if (tk>=0 & tk<0.5)
    q2=5000.0*tk;
end
if (tk>=0.5 & tk<=1.0)
    q2=2500.0;
end
if (tk>1.0 & tk<1.5)
    q2=2500.0+(tk-1.0)*2000.0;
end
if (tk>=1.5 & tk<=7.5)
    q2=3500.0;
end
if (tk>7.5 & tk<=8.0)
    q2=3500.0+7000.0*(7.5-tk);
end
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function u=velx(xi,yj)
%Componente de la velocidad en X
%u=-0.5;
%u=-pi*sin(pi*xi)*cos(pi*yj)/2;
%u=-2*(xi-0.5);
%u=-1.2*xi*cos(xi*yj);
%u=0.00;
%u=-0.5*xi;
%u=-1.0;
u=1.5;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

function v=vely(xi,yj)
%Componente de la velocidad en Y
%v=0.5;
%v=pi*cos(pi*xi)*sin(pi*yj)/2;
%v=2*(yj-0.5);
%v=1.2*yj*cos(xi*yj);
%v=0.00;
%v=0.5*yj;
%v=-1.5*(xi-1)*(xi-1);
v=(10/12)*xi;

```