



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO  
CENTRO DE CIENCIAS DE LA ATMOSFERA**

---

POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA

**“MODELO VARIACIONAL PARA LA  
REMEDIACION DE SISTEMAS ACUATICOS  
CONTAMINADOS”**

**T E S I S**

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

**MAESTRO EN CIENCIAS**

PRESENTA:

**ARTURO REYES ROMERO**

DIRECTOR DE TESIS:

**DR. DAVID PARRA GUEVARA**



MEXICO, D.F. 2008



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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.

---

***Dedicado a:***

*La memoria de Jesús Reyes Alvarez; Mi padre. Quién falleció el día en que  
iniciaría mis clases de maestría. Vaya coincidencias del destino.*

*... adiós mis queridos hermanos, mis parientes, mis vecinos de todos me voy  
despidiendo -decía la letanía mientras las campanas doblaban, anunciando que va  
camino al campo santo, porque en el pueblo donde nací, esa tradición nos dejaron  
nuestros más antiguos- y detrás ibamos amigos, vecinos y familiares, todos cargados  
de flores. En pocos minutos, tras él la tierra se cubrió de amor y paz; tras él la  
tierra floreció con ramos de lirios y rosas rojas que pusimos en memoria de su  
amor.*

*Sofía Romero; Mi madre*

*Irma, Georgina y José; Mis Hermanos*

*Mónica y Eduardo; Mis sobrinos*

*Toda la gente que quiero y que me quiere también*

---

## *Agradecimientos*

*...a que vas, la tierra para cultivar esta aquí, el estudio es para los de la ciudad, ellos "todos" son listos -jaja, por lo de todos. Perdón mil disculpas!!!- nosotros nacimos para trabajar el campo, dijeron algunas voces.*

*...quiero continuar con el doctorado!!!. Quéee?, el doctorado no es como la licenciatura o la maestría. Hacer un doctorado no es fácil, piénsalo bien. Algunas voces un tanto molestas eso dicen y más dicen.*

*Para llegar aquí, ese camino andamos y en el camino, muchas otras voces escuchamos. Por haber hecho el camino andable, quisiera a través de mi palabra escrita, expresar mis más sinceros agradecimientos a:*

*Dios por permitirme estar a donde ahora.*

*Mi director de tesis; Dr. David Parra Guevara, por todo el apoyo recibido y la paciencia para conmigo. Aprovecho también, para ofrecerle una disculpa y decirle que en verdad siento haberlo decepcionado como estudiante, pues reconozco que a veces por más esfuerzo y empeño que ponía no lograba avanzar tanto como él quería. Pero como siempre se lo manifeste, las cosas no me salían simple y sencillamente porque rebasaban mi capacidad y no porque las dejara de hacer.*

*Mi honorable jurado; Dra. E. Leticia Flores Márquez, Dra. Ma. Aurora Armienta Hernández, Dr. José Noel Carbajal Pérez y Dr. Benjamín Martínez López, quienes leyeron detenidamente este trabajo y me ayudaron a descubrir errores, ambigüedades y frases oscuras y quienes además sugirieron cambios o adiciones. Desde luego,*

---

*asumo la responsabilidad por algún error que el lector pudiera encontrar. Para ustedes mis más sinceros agradecimientos.*

*Mi estimado amigo Dr. J. Adrián Reyes Cervantes, quien de manera desinteresada me brindó un espacio y una computadora en el Instituto de Física.*

*Mis sinceros amigos; José Esteban Fernández Gárate (El Niño Verde) y Carlos Gabriel Avendaño López (El Signore). Gracias por todos sus consejos, por su apoyo incondicional, por aguantarme y comprenderme siempre, no sé como lo logran. Los aprecio mucho.*

*Mi amigo y compañero Raúl Velázquez Sánchez (El Tierno). Cuantas anécdotas y situaciones académicas hemos vivido desde la Licenciatura.*

*Mi amigo Antonio Carrillo Ledesma. Gracias por tu amistad y por responder siempre a mis dudas. Como te doy lata verdad?*

*La UNAM, por haberme formado académicamente.*

*CONACYT, por el apoyo económico brindado durante el tiempo que duraron mis estudios de maestría.*

*TODAS y todos, gracias.*

## **ARTRERO**

*Siempre temí hechar raíces que pudieran mis alas cortar y metido en la jaula la vida se me iba y quize mis fuerzas probar.*

## Índice general

---

0.1. INTRODUCCION . . . . .	I
<b>1. FUNDAMENTOS GENERALES</b>	<b>1</b>
1.1. Contaminación del Agua . . . . .	1
1.2. Modelo de remediación (modelo variacional) . . . . .	3
<b>2. MODELO DE DISPERSION</b>	<b>6</b>
2.1. Ecuación de advección difusión . . . . .	6
2.2. Ecuación de balance de masa . . . . .	9
2.3. Existencia y unicidad de la solución . . . . .	11
<b>3. MODELO ADJUNTO</b>	<b>13</b>
3.1. Identidad de Lagrange . . . . .	13
3.2. Principio de dualidad . . . . .	16
<b>4. RESULTADOS ANALITICOS</b>	<b>18</b>
4.1. Lema 1 . . . . .	18
4.2. Lema 2 . . . . .	19
4.3. Lema 3 . . . . .	19
4.4. Lema 4 . . . . .	20
4.5. Teorema 1 . . . . .	21
4.6. Teorema 2 . . . . .	23

<b>5. SEPARACION DE OPERADORES EN EDAR</b>	<b>26</b>
5.1. Esquema de Crank-Nicholson . . . . .	26
5.2. Separación de operadores componente por componente . . . . .	30
5.3. Separación de operadores en la ecuación de transporte . . . . .	37
5.4. Ecuación discreta de balance de masa . . . . .	41
<b>6. SOLUCION NUMERICA Y UNA APLICACION</b>	<b>44</b>
6.1. Discretización del modelo variacional . . . . .	44
6.2. Modelo de dispersión adjunto en 2D . . . . .	45
6.3. Remediación de un canal contaminado por zonas . . . . .	50
6.3.1. Resultados y discusión . . . . .	51
<b>7. CONCLUSIONES</b>	<b>59</b>
<b>A. Simbología</b>	<b>63</b>
<b>B. Algoritmo</b>	<b>65</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>74</b>

## 0.1. INTRODUCCION

El agua es un componente esencial para mantener la vida en todos los ecosistemas del planeta. Mientras en algunos sitios abunda en otros escasea, entre otros factores, por la contaminación de las fuentes de abastecimiento. No contaminar y al mismo tiempo diseñar e implementar estrategias para restaurar regiones acuáticas, son medidas imprescindibles para preservar sus beneficios.

Entre los principales agentes de degradación de los cuerpos de agua están los residuos industriales, agrícolas y urbanos no tratados. De estos deshechos, que por lo general contienen materia orgánica en descomposición, nacen colonias microorgánicas que generan focos de contaminación potencialmente activos causantes de infecciones crónicas y enfermedades entéricas (intestinales).

La presencia de estos microorganismos en líneas de suministro de agua potable, ríos, lagos, arroyos, zonas costeras y sistemas acuáticos en general, es un riesgo no sólo para la flora y fauna, sino también en actividades de acuicultura, pesca y turismo, etc, pues son altamente resistentes a ser eliminados con limpiadores y antibióticos [24]. La búsqueda de una solución a esta problemática, fue lo que motivo estudiar su impacto en zonas acuáticas y su posible destrucción por medios químicos (remediación de la zona infectada).

El objetivo de este trabajo, es proporcionar una expresión analítica de la función  $Q^*(t)$  que optimiza la tasa de suministro de un limpiador químico, que tiene como propósito eliminar contaminantes microorgánicos en un medio acuoso.

El método propuesto para lograr dicho objetivo, consiste en aprovechar la dirección de flujo de una corriente de agua dentro de la región de importancia ecológica  $D$ , para distribuir desde un punto  $r_0$  en  $D$ , un limpiador (cloro, yodo, ácido peracético, etc.). La descarga, se lleva a cabo durante el intervalo de tiempo  $[0, T]$ , con una tasa  $Q(t)$ . La finalidad es que este limpiador alcance concentraciones promedio críticas  $c_i$  en  $[T - \tau, T]$ . Tales concentraciones persistentes durante el tiempo  $\tau$ , deben ser suficientes para limpiar cada zona involucrada  $\Omega_i, i = 1, 2, \dots, N$  [25].

Para ello, se presenta en esta tesis el análisis de un problema de cálculo variacional cuya solución representa la tasa óptima de suministro  $Q^*(t)$  de un limpiador químico que se dispersa dentro del sistema acuático. La dispersión se modela a través de la ecuación de advección-difusión con condiciones de frontera para una región tridimensional. La concentración promedio del limpiador  $\phi$ , en cada zona contaminada  $\Omega_i$ , se calcula en forma integral a través de la solución del modelo adjunto de dispersión (estas integrales son las restricciones en el problema variacional). Finalmente se realiza un algoritmo computacional para la separación de operadores basado en un esquema Crank-Nicholson de segundo orden de aproximación.

Se complementa la teoría desarrollada, con un ejemplo de aplicación sobre un canal de agua, en este caso, se obtienen tasas óptimas de suministro físicamente aceptables [12]. Cuando no es posible construir la tasa óptima de suministro a partir de la formulación analítica, se discretiza el problema y  $Q^*(t)$  se determina por aproximación numérica. Cabe aclarar que por el momento, no se considera algún tipo de microorganismo en particular. No obstante, a futuro y como una segunda etapa de esta investigación, se pretende consolidar el modelo introduciendo las propiedades físicas y químicas que caracterizan al biofilm [24].

Estructura y organización: El capítulo 1, es introductorio y tiene como principal objetivo familiarizarnos con palabras claves como agua y modelo de remediación que son la esencia y bases de este trabajo. Los capítulos 2 y 3 estan enfocados básicamente a hacer una descripción física y matemática del fenómeno de dispersión. Los cálculos y argumentos matemáticos para encontrar analíticamente la tasa óptima de suministro se dan con detalle en el capítulo 4. En el capítulo 5, se presenta la implementación de diferentes técnicas numéricas para resolver la ecuación de transporte. El contenido del capítulo 6, corresponde a la discretización del problema variacional continuo y a un ejemplo de aplicación. Finalmente se presentan las conclusiones en el capítulo 7.

---

# Capítulo 1

## FUNDAMENTOS GENERALES

---

En este primer capítulo se trata el tema del agua resaltando los factores que contribuyen a su contaminación. También se describe en la parte final, el *modelo de remediación*.

### 1.1. Contaminación del Agua

El total de agua en nuestro planeta es de  $1.4 \times 10^{12}$  kilómetros cúbicos ( $\text{km}^3$ ). Esta cantidad se encuentra distribuida de manera no uniforme y cubre entre el 70 % y 75 % de la superficie del planeta. El agua, se clasifica en dos grandes grupos; dulces y saladas. Las últimas, se encuentran en los océanos y representan el 97.5 %. A las primeras, también se les conoce como aguas continentales, son bajas en sales y comprenden un 2.5 %, del cual, aproximadamente el 1.7 % esta almacenada y congelada en los polos, glaciares y nieves permanentes; un poco más de 0.7 % en depósitos subterráneos, y apenas un 0.01 %, disponible para los ecosistemas y actividades humanas en lugares accesibles ( lagos, presas, ríos y arroyos), sin embargo, este porcentaje varía considerablemente según el lugar, el clima o la época del año, más aún, esta disminuyendo por los efectos de la contaminación antropogénica principalmente [27].

La descarga de aguas residuales urbanas e industriales no tratadas, el arrastre pluvial de algunos residuos agrícolas (abonos) y la lluvia ácida son fuentes comunes de contaminación. Los contaminantes más frecuentes son materia orgánica, petroquímicos, metales y productos químicos tóxicos ( plomo, cadmio, mercurio, arsénico, uranio, torio, fósforo, pesticidas, herbicidas, insecticidas, solventes, nitratos, sustancias ácidas, etc.)[28].

El agua contaminada con materia orgánica contiene bacterias, virus y parásitos intestinales son el elemento básico para la formación de conglomeraciones microorgánicas que más tarde aparecen en ríos, lagos, zonas costeras, etc. Además de las enfermedades que inducen, los microorganismos que las forman (a través de la degradación biológica de la materia orgánica) consumen grandes cantidades del oxígeno disuelto en el agua, alterando el equilibrio ecológico en los sistemas acuáticos. Algunos desinfectantes utilizados para su destrucción son yodo, cloro, formaldehído, glutaraldehído, ácido peracético, entre otros [29].

Más allá de la causa (natural o de procedencia humana) en cuanto a la contaminación de este líquido, lo cierto es que se sobrepasa la capacidad de autodepuración de la naturaleza. Al ser un recurso imprescindible para la vida humana y para el desarrollo socioeconómico, industrial y agrícola, una situación de escasez amenaza tres aspectos fundamentales del bienestar humano: la producción de alimentos, la salud y la estabilidad política y social. Es por esto que, su gestión deberá tender a evitar situaciones conflictivas debidas a escasez, sobreexplotación y contaminación, mediante medidas preventivas que procuren un uso racional y de conservación.

## 1.2. Modelo de remediación (modelo variacional)

La técnica (modelo de remediación) que se propone y que pretende recuperar ecosistemas acuáticos contaminados, consiste en alcanzar por dispersión concentraciones críticas de un agente químico que elimine los microorganismos (originados principalmente por materia orgánica en descomposición) en zonas internas afectadas. Formalmente, se plantea el problema como sigue.

Supóngase que  $D$  representa una región acotada; un río, un lago o una costa con entradas y salidas de flujo que tiene  $N$  zonas internas contaminadas  $\Omega_i, i = 1, 2, \dots, N$ . Para remediar cada una de estas zonas, se descarga desde el punto  $r_0 \in D$  y durante el intervalo de tiempo  $0 \leq t \leq T$ , un limpiador químico cuya tasa de suministro es  $Q(t)$ . La elección del punto  $r_0$ , se hace de acuerdo a la dirección del campo de velocidades, para que el limpiador arrastrado por la circulación del agua llegue a cada  $\Omega_i \subset D$  [25], en donde transcurrido el tiempo  $[T - \tau, T]$ , deberá alcanzar concentraciones promedio críticas  $c_i$  (medidas en  $\text{gr}/\text{m}^3$ ), las cuales se mantendrán un tiempo  $\tau$ , suficiente para eliminar los microorganismos en la zona correspondiente antes de su desvanecimiento. Por simplicidad, se suponen zonas disjuntas, esto es  $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset, \forall i \neq j$ . Véase la figura 1.1.

El planteamiento anterior, se traduce en un problema del cálculo de las variaciones [5]. De acuerdo con esto, el modelo para calcular la tasa de suministro  $Q(t)$ , que permite alcanzar las concentraciones críticas  $c_i$  en las diferentes zonas contaminadas  $\Omega_i$ , se formula en los siguientes términos,

$$m(Q) = \sqrt{\int_0^T Q^2(t) dt}$$

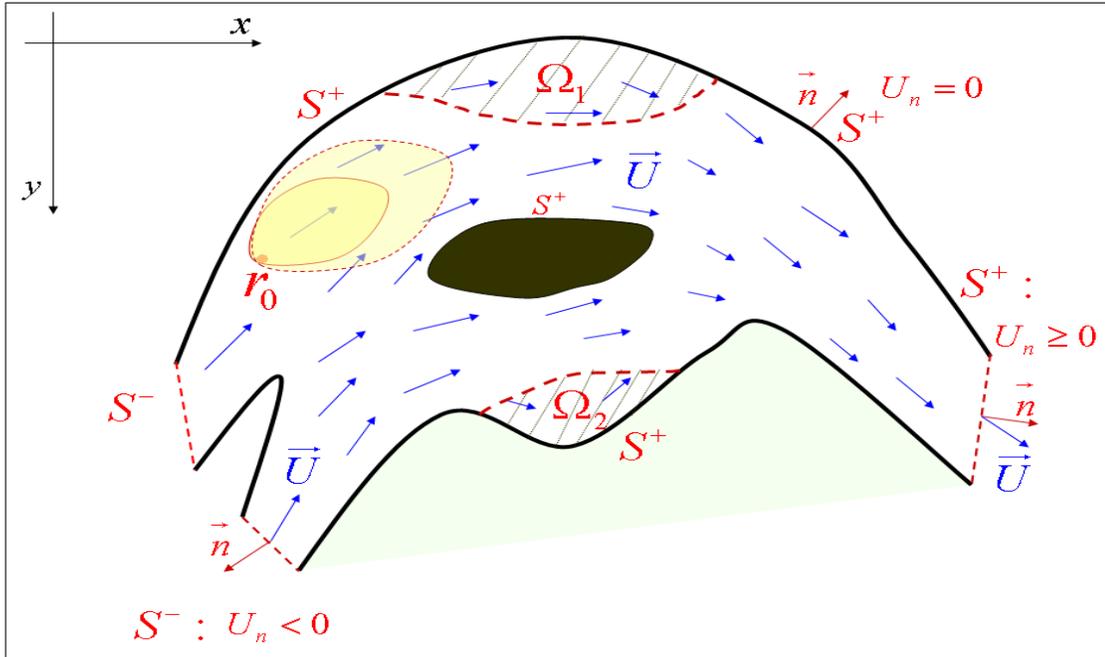


Figura 1.1: Dispersión de un limpiador aprovechando la dinámica en la región D.

sujeto a las restricciones

$$Q(t) \geq 0, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (1.1)$$

$$J_i(\phi) = \frac{1}{\tau |\Omega_i|} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega_i} \phi(r, t) dr dt = c_i, \quad i = 1, \dots, N.$$

Aquí  $m(Q)$  representa la funcional que estima la masa total del limpiador suministrado y  $J_i(\phi)$  es la funcional que calcula la concentración promedio del limpiador en cada zona  $\Omega_i$ . Donde  $\phi = \phi(r, t)$  denota la concentración puntual del limpiador en  $r = (x, y, z)$  al tiempo  $t$  y es una función que se determina mediante un modelo de dispersión (Capítulo 2).

Debe apuntarse que el procedimiento no es útil o práctico cuando el punto  $r_0$  no está correctamente ubicado respecto a la dirección del flujo y la posición de las

zonas  $\Omega_i$ , si el tiempo  $T$  no es suficiente para la completa diseminación del limpiador ó si no se le da a éste el tiempo de acción  $\tau$  necesario.

Por otra parte, en caso de haber diferentes tasas de suministro  $Q(t)$ , conviene aplicar la que introduce una cantidad de masa menor  $Q^*(t)$  (tasa óptima), y con ello no sólo disminuir los costos de su aplicación (control óptimo), si no también los daños colaterales en el resto del ecosistema. Estas son las razones por las que se minimiza la funcional  $m(Q)$  y cuyo mínimo es justamente  $Q(t)$ .

---

## Capítulo 2

### MODELO DE DISPERSION

---

En este capítulo se simula a partir de la ecuación de transporte, el proceso de dispersión del fluido que actúa como limpiador en la formulación (1.1) de la sección (1.2). Se verifica que este modelo satisface la ecuación de balance de masa y se demuestra que es un problema matemático bien planteado en el sentido de Hadamard.

#### 2.1. Ecuación de advección difusión

La Ecuación de Difusión-Advección-Reacción (EDAR), aparece en el estudio de la propagación de sustancias contaminantes en el océano o la atmósfera. La solución asociada a ésta, representa físicamente la concentración de la sustancia que se dispersa. Esta información es útil en diversas situaciones tales como estimación del impacto ambiental por derrames de petróleo [21], ubicación de plantas industriales en lugares estratégicos [9], localización del sitio de una explosión nuclear [17] y control de emisiones industriales [15, 16]. Su forma más general, esta dada por la expresión,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi + \sigma \phi + \nabla \cdot \vec{\phi}_s = f(\vec{r}, t), \quad (2.1)$$

donde  $f(\vec{r}, t)$  es el forzamiento determinado por las fuentes de emisión del contaminante. Cuando las fuentes son puntuales el forzamiento toma la forma

$$f(\vec{r}, t) = \sum_{i=0}^N Q_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (2.2)$$

$Q_i$  es la tasa de emisión no-estacionaria de la fuente ubicada en  $\vec{r}_i \in D$  y  $\delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$  es la **función delta de Dirac** [1] centrada en  $\vec{r}_i$ .

Como cualquier ecuación diferencial la obtención de una solución particular exige imponer las condiciones de contorno propias del problema que se aborda. La posibilidad de resolver (2.1) por medios analíticos es limitada, sin embargo los métodos numéricos permiten su solución, no obstante en casos complejos tampoco son sencillos de implementar.

Para calcular la distribución espacial y temporal de  $\phi(r, t)$  en un intervalo de tiempo  $[0, T]$ , se utiliza (2.1), bajo las siguientes condiciones de frontera en la región  $D \subset \mathbb{R}^3$ :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi + \sigma \phi + \nabla \cdot \vec{\phi}_s = Q(t) \delta(r - r_0) \quad (2.3)$$

$$\vec{\phi}_s = -\nu_s \phi \vec{k} \quad \text{en } D \quad (2.4)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} - \zeta \phi \vec{k} \cdot \vec{n} \quad \text{en } S_T, \quad \mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} \quad \text{en } S_B \quad (2.5)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = 0, \quad \text{en } S^+, \quad \mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = U_n \phi \quad \text{en } S^- \quad (2.6)$$

$$\phi(r, 0) = \phi^0(r) \quad \text{en } D \quad (2.7)$$

$$\nabla \cdot \vec{U} = 0 \quad \text{en } D \quad (2.8)$$

Donde el vector  $\vec{U} = U(r, t)$ , denota la velocidad del campo advectivo en  $D$ , en este caso del agua que es el medio de transporte de la sustancia, y para el cual se asume cumple la ecuación de continuidad o condición de incompresibilidad (2.8),  $\mu(r, t)$

es el coeficiente de difusión turbulenta,  $\sigma(r, t)$  es el coeficiente de transformación química del limpiador,  $\vec{\phi}_s$  es el gradiente de sedimentación con velocidad constante  $\nu_s$ . Como se explicó  $\delta(r - r_0)$  es la función delta de Dirac centrada en  $r_0$  y  $Q(t)$  la tasa de emisión ubicada en este mismo punto<sup>1</sup>.

En relación a las ecuaciones (2.5)-(2.6), se adopta la notación  $S$ , para referirse a las fronteras físicas del sistema representado esquemáticamente en la figura 2.1. En este contexto, las ecuaciones (2.5) establecen las condiciones de frontera en la superficie  $S_T$  (con  $\zeta(r, t)$  el coeficiente de evaporación del limpiador) y en el fondo de la región  $S_B$ , asimismo (2.6) describe las condiciones de frontera laterales (verticales), donde  $S^+$  es la parte cerrada o de salida de flujo ( $U_n = \vec{U} \cdot \vec{n} \geq 0$ ) y  $S^-$  es la porción de ingreso de flujo  $U_n < 0$ . La condición inicial (2.7) determina la distribución del limpiador al tiempo  $t = 0$ . En todas las ecuaciones  $\vec{n}$  es el vector normal unitario exterior a cada uno de los lados que conforman la frontera  $\partial D = S_T \cup S^+ \cup S^- \cup S_B$  y  $\vec{k} = (0, 0, 1)^t$  es un vector unitario que apunta en la dirección  $z$  en un sistema de coordenadas cartesiano. Es importante señalar que las condiciones de frontera (2.5)-(2.6) toman en cuenta la rugosidad del fondo y la superficie (no necesariamente planos).

De la figura 2.1, se ve que los vectores  $\vec{k}$  y  $\vec{U}$  son perpendiculares a la normal de las caras  $S^+$ ,  $S^-$  y  $S_T$ ,  $S_B$  respectivamente, por consiguiente, se debe cumplir,

$$\vec{k} \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{en } S^+ \cup S^- \quad \text{y} \quad \vec{U} \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{sobre } S_T \cup S_B. \quad (2.9)$$

---

<sup>1</sup>La simbología empleada en todo este trabajo, se puede consultar en el apéndice A.

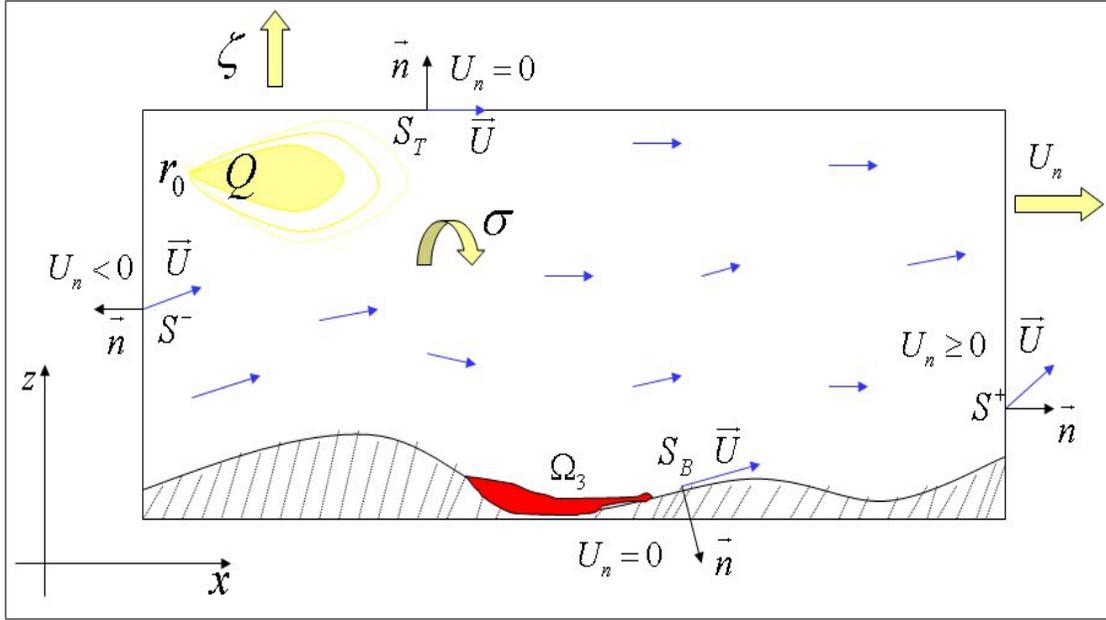


Figura 2.1: Representación esquemática de los procesos físicos que ocurren en la región  $D$ , vista en un corte del plano  $xz$ .

## 2.2. Ecuación de balance de masa

Integrando la ecuación de advección-difusión (2.3) sobre el dominio  $D$ , se tiene,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi dr + \int_D \vec{U} \cdot \nabla \phi dr - \int_D \nabla \cdot \mu \nabla \phi dr + \int_D \sigma \phi dr + \int_D \nabla \cdot \vec{\phi}_s dr = \int_D Q(t) \delta(r - r_0) dr \quad (2.10)$$

De acuerdo con el *teorema de la divergencia de Gauss* [7], se puede escribir,

$$\int_D \vec{U} \cdot \nabla \phi dr = \int_D \nabla \cdot \vec{U} \phi dr = \int_{\partial D} \vec{U} \cdot \vec{n} \phi dS \quad (2.11)$$

$$\int_D \nabla \cdot \mu \nabla \phi dr = \int_{\partial D} \mu \nabla \phi \cdot \vec{n} dS = \int_{\partial D} \mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} dS \quad (2.12)$$

$$\int_D \nabla \cdot \vec{\phi}_s dr = \int_{\partial D} \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} dS \quad (2.13)$$

De manera más concisa (2.11), se escribe como

$$\int_{\partial D} \vec{U} \cdot \vec{n} \phi dS = \int_{S_T} \vec{U} \cdot \vec{n} \phi dS + \int_{S^+} \vec{U} \cdot \vec{n} \phi dS + \int_{S^-} \vec{U} \cdot \vec{n} \phi dS + \int_{S_B} \vec{U} \cdot \vec{n} \phi dS \quad (2.14)$$

Empleando la condición (2.9) y recordando que  $U_n = \vec{U} \cdot \vec{n}$ , la integral (2.14), se simplifica a

$$\int_{\partial D} \vec{U} \cdot \vec{n} \phi dS = \int_{S^+} U_n \phi dS + \int_{S^+} U_n \phi dS \quad (2.15)$$

Análogamente se aplican las condiciones de frontera (2.5)–(2.6) en (2.12), para obtener,

$$\int_{\partial D} \mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} dS = \int_{S_T} \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} dS - \int_{S_T} \zeta \phi \vec{k} \cdot \vec{n} dS + \int_{S^-} U_n \phi dS + \int_{S_B} \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} dS \quad (2.16)$$

De igual manera, las relaciones (2.4) y (2.9) en (2.13) conducen a,

$$\int_{\partial D} \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} dS = \int_{S_T} \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} dS + \int_{S_B} \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} dS \quad (2.17)$$

Luego de sustituir y reacomodar términos en la ecuación (2.10),

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi dr = Q(t) - \int_D \sigma \phi dr - \int_{S^+} U_n \phi dS - \int_{S^T} \zeta \phi \vec{k} \cdot \vec{n} dS \quad (2.18)$$

El resultado (2.18), se conoce como **ecuación de balance de masa** y establece que la razón de cambio de la masa total en la región  $D$ , depende de la tasa de suministro  $Q(t)$ , menos las pérdidas por transformación química  $\sigma$ , flujo de salida  $U_n$  y evaporación  $\zeta$ . Nótese en la ecuación (2.18), que la componente de sedimentación, no interviene en el flujo de la frontera  $\partial D$ , lo que indica que el proceso sólo ocurre en el interior de  $D$ .

El modelo (2.3)-(2.8) es físicamente aceptable por que cumple, como se acaba de verificar, con el principio de conservación de la masa.

## 2.3. Existencia y unicidad de la solución

Consideremos un operador  $A$  sobre la función  $\phi$ , de modo que,

$$A\phi = \vec{U} \cdot \nabla\phi - \nabla \cdot \mu \nabla\phi + \sigma\phi + \nabla \cdot \vec{\phi}_s \quad (2.19)$$

Entonces, por definición de producto interno de  $A\phi$  con  $\phi$  en  $L_2(D)$ ,

$$(A\phi, \phi) = \int_D \phi A\phi dr = \int_D \phi \vec{U} \cdot \nabla\phi dr + \int_D \sigma\phi^2 dr - \int_D \phi \nabla \cdot \mu \nabla\phi dr + \int_D \phi \nabla \cdot \vec{\phi}_s dr \quad (2.20)$$

Siguiendo el mismo procedimiento como en la sección 2.2, para las integrales que involucran divergencia, es fácil comprobar que

$$(A\phi, \phi) = \frac{1}{2} \left\{ \int_{S^+} U_n \phi^2 dS - \int_{S^-} U_n \phi^2 dS + \int_{S_T} v_s \phi^2 \vec{k} \cdot \vec{n} dS \right\} \\ + \int_D \sigma\phi^2 dr + \int_D \mu |\nabla\phi|^2 dr + \int_{S_T} \zeta \phi^2 \vec{k} \cdot \vec{n} dS \quad (2.21)$$

Teniendo presente las condiciones  $U_n < 0$  en  $S^-$  y  $\vec{k} \cdot \vec{n} > 0$  en  $S_T$ , claramente  $(A\phi, \phi) \geq 0$ , de donde se deduce que el operador  $A$ , siempre es positivo semidefinido.

En otro orden de ideas, calculando el producto interno en  $L_2(D)$  respecto de  $\phi$  en ambos lados de la ecuación (2.3), se llega a

$$\left( \frac{\partial\phi}{\partial t}, \phi \right) = (f, \phi) - (A\phi, \phi), \quad f(r, t) = Q(t)\delta(r - r_0) \quad (2.22)$$

Aplicando la *desigualdad de Schwarz* [18],

$$\left| \left( \phi, \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) \right| \leq \|\phi\| \left\| \frac{\partial \phi}{\partial t} \right\| \quad \text{y} \quad |(f, \phi)| \leq \|f\| \|\phi\| \quad (2.23)$$

Como  $(\phi, A\phi) \geq 0$ , entonces de (2.22), se sigue

$$\left| \left( \phi, \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) \right| \leq \|\phi\| \|f\|, \quad \text{donde} \quad \|\phi\| = \sqrt{(\phi, \phi)} \quad (2.24)$$

Por otro lado,

$$\left( \phi, \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} \|\phi\|^2 = \|\phi\| \frac{\partial}{\partial t} \|\phi\|, \quad (2.25)$$

combinando (2.24) y (2.25),

$$\frac{\partial}{\partial t} \|\phi\| \leq \|f\| \quad (2.26)$$

Después de integrar sobre un intervalo de tiempo  $(0, T)$ , se concluye

$$\|\phi\| \leq T \max_{0 \leq t \leq T} \|Q(t)\delta(r - r_0)\| + \|\phi^0(r)\| \quad (2.27)$$

La linealidad del modelo (2.3)–(2.8) respecto de  $\phi$  y la desigualdad (2.27) garantizan la unicidad y la continuidad de la solución respecto de la condición inicial y del forzamiento. Por lo tanto, el modelo de dispersión (2.3)–(2.8), es un problema matemáticamente bien planteado en el *sentido de Hadamard* [6]. Como  $A$  es un operador positivo semidefinido, se puede implementar un algoritmo numérico de solución [9], basado en un esquema incondicionalmente estable como *Crank-Nicholson* [3] a segundo orden de aproximación en la variable temporal y la separación de operadores por componentes en el espacio [22].

---

## Capítulo 3

### MODELO ADJUNTO

---

En este capítulo se incorpora el modelo adjunto de dispersión y se encuentra la relación entre la concentración promedio y la tasa de suministro del agente limpiador (principio de dualidad).

#### 3.1. Identidad de Lagrange

El problema variacional 1.2 es difícil de analizar y resolver, debido a que las restricciones  $J_i(\phi) = c_i$ ,  $i = 1, 2, 3, \dots, N$  contienen la variable de control  $Q(t)$  en forma implícita, es decir,  $Q(t)$  está ligada con la variable de estado  $\phi$  a través de (2.3–2.8). El siguiente objetivo es conocer la influencia explícita de  $Q(t)$  en dichas restricciones, para lograrlo, es necesario introducir un modelo adjunto de dispersión, esto es posible a través de la identidad de Lagrange,

$$(A\phi, g) = (\phi, A^*g) \quad (3.1)$$

En la ecuación (3.1),  $A^*$  es un operador,  $g$  es una función de peso y  $(\cdot, \cdot)$  es el producto interno definido en  $L_2(D)$  [18, 9, 20, 14, 15, 19]. Desarrollando el lado izquierdo de (3.1),

$$(A\phi, g) = \int_D g \vec{U} \cdot \nabla \phi dr + \int_D \sigma g \phi dr - \int_D g \nabla \cdot \mu \nabla \phi dr + \int_D g \nabla \cdot \vec{\phi}_s dr \quad (3.2)$$

Siguiendo un razonamiento análogo al de la sección 2.3, entonces,

$$\int_D g \vec{U} \cdot \nabla \phi dr = \int_{\partial D} g \phi \vec{U} \cdot \vec{n} dS - \int_D \phi \vec{U} \cdot \nabla g dr \quad (3.3)$$

$$\int_D g \nabla \cdot \mu \nabla \phi dr = \int_{\partial D} g \mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} dS - \int_{\partial D} \phi \mu \frac{\partial g}{\partial \vec{n}} dS + \int_D \phi \nabla \cdot \mu \nabla g dr \quad (3.4)$$

$$\int_D g \nabla \cdot \vec{\phi}_s dr = \int_{\partial D} g \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} dS - \int_D \phi \nabla \cdot \vec{g}_s dr \quad (3.5)$$

donde  $\vec{g}_s = -v_s g \vec{k}$  en la ecuación (3.5). Es decir,

$$(A\phi, g) = \int_D \phi \left( -\vec{U} \cdot \nabla g - \nabla \cdot \mu \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot \vec{g}_s \right) dr \quad (3.6)$$

$$+ \int_{\partial D} g \phi \vec{U} \cdot \vec{n} dS + \int_{\partial D} \phi \mu \frac{\partial g}{\partial \vec{n}} dS - \int_{\partial D} g \mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} dS + \int_{\partial D} g \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} dS.$$

Nuevamente, utilizando el hecho de que la frontera del sistema  $\partial D$ , se compone de cuatro partes ( $S_T$ ,  $S^+$ ,  $S^-$  y  $S_B$ ), y de las condiciones (2.5)– (2.6) y (2.8) aplicadas a (3.1), el producto interno ahora se expresa como

$$(A\phi, g) = \int_D \phi \left( -\vec{U} \cdot \nabla g - \nabla \cdot \mu \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot \vec{g}_s \right) dr \quad (3.7)$$

donde la función  $g$  satisface las condiciones de frontera equivalentes a (2.5)– (2.6).

Por consiguiente, la identidad de Lagrange se satisface si

$$A^*g = -\vec{U} \cdot \nabla g - \nabla \cdot \mu \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot \vec{g}_s \quad (3.8)$$

Por otro lado, multiplicando la ecuación (2.3) por  $g$  e integrando sobre el dominio espacial y temporal  $D \times (0, T)$ , resulta

$$\int_0^T \int_D g \frac{\partial \phi}{\partial t} dr dt + \int_0^T \int_D g A \phi dr dt = \int_0^T \int_D g Q(t) \delta(r - r_0) dr dt \quad (3.9)$$

Haciendo el cambio de variable  $u = g(r, t)$  y  $dv = \frac{\partial \phi}{\partial t} dr dt$ , se integra por partes la primera integral del lado izquierdo, donde se impone la condición de restricción  $g(r, T) = 0$  en  $D$ . Luego de aplicar la condición de lagrange (3.1) a la segunda integral del mismo lado y reacomodar términos, (3.9) se convierte en

$$\int_0^T \int_D \phi \left\{ -\frac{\partial g}{\partial t} + A^* g \right\} dr dt = \int_0^T Q(t) g(r_0, t) dt + \int_D g(r, 0) \phi^0(r) dr \quad (3.10)$$

La ventaja de la ecuación (3.10), es que relaciona explícitamente la tasa de descarga  $Q(t)$  con la concentración  $\phi(r, t)$ , a través de la función  $g$ . Entonces, es factible el modelo de dispersión adjunto,

$$-\frac{\partial g}{\partial t} - \vec{U} \cdot \nabla g - \nabla \cdot \mu \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot \vec{g}_s = p(r, t) \quad (3.11)$$

$$\vec{g}_s = -v_s g \vec{k} \quad \text{en } D \quad (3.12)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial \vec{n}} + \zeta g \vec{k} \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{sobre } S_T \quad (3.13)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial \vec{n}} + U_n g = 0 \quad \text{sobre } S^+ \quad (3.14)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{sobre } S^- \quad (3.15)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{sobre } S_B \quad (3.16)$$

$$g(r, T) = 0 \quad \text{en } D \quad (3.17)$$

Las condiciones (3.12)-(3.17) impuestas a  $g$  son tales, que la identidad de Lagrange (3.1) se satisface. También el forzamiento  $p(r, t)$  en la ecuación (3.11), debe ser tal que la concentración promedio del limpiador  $J_i(\phi)$  en una zona  $\Omega \subset D$ , se relacione explícitamente con  $Q(t)$  y  $\phi^0(r)$  mediante la solución adjunta  $g$ . Esto se logra, si

$$p(r, t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau |\Omega|}, & r \in \Omega \text{ y } t \in (T - \tau, T) \\ 0, & \text{en otro lado} \end{cases} \quad (3.18)$$

donde  $|\Omega|$  es el volúmen y  $\tau$  es el tiempo requerido para que el limpiador alcance su concentración crítica en la zona  $\Omega$ .

## 3.2. Principio de dualidad

Reemplazando el forzamiento (3.18) en la ecuación (3.10), podemos encontrar la relación de la concentración promedio  $J_i(\phi)$ , en función de la tasa  $Q(t)$  y de las soluciones adjuntas  $g_i(r_0, t)$ , a saber,

$$J_i(\phi) = \int_0^T Q(t) g_i(r_0, t) dt + \int_D g_i(r, 0) \phi^0(r) dr; \quad (3.19)$$

$$\gamma_i = \int_0^T Q(t) g_i(r_0, t) dt = J_i(\phi) - \int_D g_i(r, 0) \phi^0(r) dr \quad (3.20)$$

La ecuación (3.19) suele llamarse principio de dualidad y para el caso especial en que  $\phi^0(r) = 0$ , se reduce a,

$$J_i(\phi) = \int_0^T Q(t)g_i(r_0, t)dt \quad (3.21)$$

La relación integral (3.21), aplicada en cada zona  $\Omega_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , conduce al problema variacional,

$$m(Q) = \sqrt{\int_0^T Q^2(t)dt}$$

sujeto a  $Q(t) \geq 0$ ,  $0 \leq t \leq T$ , y

$$\int_0^T g_i(r_0, t)Q(t)dt = c_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (3.22)$$

La formulación (3.22) es equivalente a (1.1), sólo que ahora las soluciones adjuntas  $g_i(r_0, t)$  en la  $i$  ésima restricción son independientes de la tasa de suministro  $Q(t)$ . Estas soluciones no negativas se determinan de acuerdo a la dinámica de fluidos en  $D$ , actúan como funciones de peso y representan la influencia del punto de descarga  $r_0$  en la concentración del limpiador para cada zona  $\Omega_i$ . En teoría de control, se les denomina funciones de información o influencia y tienen aplicación en el análisis de la sensibilidad de variables en modelos meteorológicos, oceanográficos y de dispersión de contaminantes respecto de perturbaciones en los parámetros, en asimilación de datos geofísicos, identificación de fuentes contaminantes (ubicación e intensidad de explosiones nucleares o emisiones accidentales), y en control óptimo de emisiones industriales [9, 14, 15, 20].

---

## Capítulo 4

### RESULTADOS ANALITICOS

---

En el presente capítulo, se analiza con base en algunas propiedades del conjunto de factibilidad  $\Theta$  y de la funcional  $m(Q)$ , la existencia y unicidad de la solución del problema variacional (3.22). Se utiliza el método de multiplicadores de Lagrange para hallar la expresión analítica de la tasa de suministro óptimo  $Q^*(t)$ .

#### 4.1. Lema 1

**Lema 1.** *Conjunto de factibilidad*

$$\Theta = \left\{ \begin{array}{l} Q(t) \in L_2(0, T) \\ Q(t) \geq 0, \quad t \in (0, T) \end{array} \quad y \quad \left. \begin{array}{l} \int_0^T Q(t) g_i(r_0, t) dt = c_i \\ (i = 1, \dots, N) \end{array} \right\} \quad (4.1)$$

es un conjunto convexo en  $L_2(0, T)$ .

**Demostración 1.** *Supóngase que  $Q_1, Q_2 \in \Theta$  y  $\lambda \in (0, 1)$ . Entonces,  $\lambda Q_1 + (1 - \lambda) Q_2 \geq 0$ ,  $0 \leq t \leq T$ . Además,*

$$\int_0^T (\lambda Q_1 + (1 - \lambda) Q_2) g_i(r_0, t) dt = \lambda c_i + (1 - \lambda) c_i = c_i, \quad (i = 1, \dots, N) \quad (4.2)$$

por lo tanto,  $\Theta$  es convexo.

## 4.2. Lema 2

**Lema 2.** *El conjunto de factibilidad  $\Theta$  es un conjunto cerrado en  $L_2(0, T)$ .*

**Demostración 2.** *P.d que  $\Theta = \bar{\Theta}$ . Sea  $Q_0$  un elemento de  $\bar{\Theta}$ . Entonces existe una secuencia  $\{Q_k\}_{k=1}^{\infty}$  en  $\Theta$  tal que*

$$\|Q_k - Q_0\| \rightarrow 0 \quad \text{sí } k \rightarrow \infty \quad (4.3)$$

*Asumiendo que  $Q_0(t) < 0$  en algún intervalo  $I \subset (0, T)$  de medida positiva  $|I| > 0$ . Entonces*

$$\|Q_k - Q_0\|^2 = \int_0^T (Q_k - Q_0)^2 dt \geq \int_I (Q_k - Q_0)^2 dt \geq \int_I Q_0^2 dt = l > 0 \quad (4.4)$$

*Esta última desigualdad contradice la convergencia de  $\{Q_k\}_{k=1}^{\infty}$  en  $L_2(0, T)$ , por lo tanto,  $Q_0$  es una función positiva en  $(0, T)$ .*

*Por otra parte, la desigualdad de Schwarz conduce a*

$$\left| c_i - \int_0^T Q_0 g_i(r_0, t) dt \right| = \left| \int_0^T (Q_k - Q_0) g_i(r_0, t) dt \right| \leq \|Q_k - Q_0\| \|g_i\| \rightarrow 0 \quad (4.5)$$

*y en el caso limite cuando  $k \rightarrow \infty$ , se obtiene  $\int_0^T Q_0 g_i(r_0, t) dt = c_i$ , ( $i = 1, \dots, N$ ), lo cual implica que,  $Q_0 \in \Theta$ .*

## 4.3. Lema 3

**Lema 3.** *La funcional  $m(Q)$  del problema (3.22) es estrictamente convexa sobre el conjunto de factibilidad  $\Theta$ .*

**Demostración 3.** Si  $Q_1, Q_2 \in \Theta$  ( $Q_1 \neq Q_2$ ) y  $\lambda \in (0, 1)$  entonces

$$m(\lambda Q_1 + (1 - \lambda)Q_2) = \int_0^T Q_2^2 dt + 2\lambda \int_0^T Q_2 (Q_1 - Q_2) dt + \lambda^2 \int_0^T (Q_1 - Q_2)^2 dt \quad (4.6)$$

Como  $\lambda^2 < \lambda$  se tiene

$$\lambda^2 \int_0^T (Q_1 - Q_2)^2 dt < \lambda \int_0^T (Q_1 - Q_2)^2 dt \quad (4.7)$$

Una transformación directa muestra que

$$m(\lambda Q_1 + (1 - \lambda)Q_2) < \lambda m(Q_1) + (1 - \lambda)m(Q_2). \quad (4.8)$$

## 4.4. Lema 4

**Lema 4.** [2]. Un conjunto cerrado convexo y no vacío en un espacio de Banach uniformemente convexo posee un único punto en una vecindad.

Nótese que los lemas 1-3 se probaron bajo la condición de que  $\Theta$  es un conjunto no vacío. Ésta es una propiedad no trivial del conjunto de factibilidad (4.1) y una condición necesaria para satisfacerla, es que  $g_i(r_0, t) > 0$  en un intervalo abierto  $I_i \subset (0, T)$ ,  $1 \leq i \leq N$ . Esto sugiere que el punto  $r_0$  no es arbitrario, por tanto debe elegirse de modo que durante el intervalo de tiempo  $(0, T)$ , el limpiador alcance cada zona contaminada  $\Omega_i$  por medio de los procesos del modelo de dispersión. Sin embargo, tal condición no es suficiente (salvo en el caso  $N = 1$ ). Ya que, si

$$0 < g_j(r_0, t) < g_k(r_0, t), \quad 0 \leq t \leq T,$$

y  $c_j \geq c_k$ , entonces el conjunto de factibilidad  $\Theta$  es vacío, y el problema (3.22) no tiene solución. Lo mismo sucede cuando hay simetría dinámica y geométrica para dos zonas diferentes  $\Omega_j$  y  $\Omega_k$ , es decir, cuando

$$0 < g_j(r_0, t) = g_k(r_0, t) \text{ para } t \in [0, T], \quad (4.9)$$

y  $c_j \neq c_k$ . En conclusión, para zonas distintas pero muy cercanas entre sí, no es recomendable intentar alcanzar las concentraciones críticas desde el mismo punto de descarga  $r_0$ . Suponiendo que  $r_0$  se elige de manera que se satisfaga la condición necesaria anterior, y que el espacio de factibilidad es no vacío, entonces la solución de (3.22) existe y es única.

## 4.5. Teorema 1

**Teorema 1.** *Si el conjunto de factibilidad  $\Theta$  es no vacío entonces el problema variacional (3.22) tiene solución única.*

**Demostración.** *Dado que la funcional  $m(Q)$ , es estrictamente convexa (lema 3) definida en el conjunto convexo  $\Theta$  (lema 1), entonces si existe un mínimo, este es global y único [2].*

*Por otra parte, dado que  $L_2(0, T)$  es un espacio de Hilbert, es un espacio de Banach uniformemente convexo [2]. Además, por los lemas (1) y (2), el conjunto de factibilidad  $\Theta$  es un conjunto cerrado y convexo en  $L_2(0, T)$ . Nótese que  $Q \equiv 0 \notin \Theta$ , dadas las restricciones del problema (4.1), las concentraciones críticas  $c_i$  son positivas para cualquier  $i$  ( $i = 1, \dots, N$ ). Por lo tanto, (lema 4), este es un punto  $Q^* \in \Theta$  que minimiza la distancia entre el conjunto  $\Theta$  y el punto  $Q \equiv 0$ . Este punto es la solución de (3.22).*

La expresión analítica para la tasa óptima de suministro del limpiador  $Q(t)^*$  se encuentra por el método de los multiplicadores de Lagrange [23] aplicado al problema variacional (3.22). Sea

$$F(Q) = \frac{1}{2} \int_0^T Q^2(t) dt - \sum_{j=1}^N \alpha_j \left\{ \int_0^T Q(t) g_j(r_0, t) dt - c_j \right\} \quad (4.10)$$

la funcional Lagrangiana y  $\alpha_j$  los multiplicadores de Lagrange. Por consiguiente, la primera variación de  $F$  (en el contexto de Gateaux [23]) viene dada por,

$$\delta F(Q; \delta Q) = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} F(Q + \varepsilon \delta Q)_{\varepsilon=0} = \int_0^T \left\{ Q(t) - \sum_{j=1}^N \alpha_j g_j(r_0, t) \right\} \delta Q dt \quad (4.11)$$

donde  $\delta Q$  es la variación de  $Q$ . Una condición necesaria para que  $Q^*$  sea un mínimo es que  $\delta F(Q^*; \delta Q) = 0, \forall \delta Q$  [23]. Por lo tanto,

$$Q^*(t) = \sum_{j=1}^N \alpha_j g_j(r_0, t) \quad (4.12)$$

donde los multiplicadores de Lagrange  $\alpha_j$  se encuentran resolviendo el sistema lineal algebraico

$$\sum_{j=1}^N \alpha_j \left\{ \int_0^T g_i(r_0, t) g_j(r_0, t) dt \right\} = c_i, \quad (i = 1, \dots, N) \quad (4.13)$$

formado por la restricción integral del problema (3.22). A continuación se demuestra que (4.12) y (4.13) son condiciones suficientes para un mínimo.

## 4.6. Teorema 2

**Teorema 2.** *Si  $Q^*(t)$ , por (4.12) y (4.13), es una función no negativa en  $(0, T)$  entonces esta es la tasa de descarga óptima.*

**Demostración.** *Dado que  $Q_0 = Q^* + \delta Q$  es una tasa de descarga factible ( $Q_0 \in \Theta$ ), entonces  $\int_0^T \delta Q g_i(r_0, t) dt = 0$ , donde  $\delta Q \neq 0$  es una variación arbitraria de  $Q^*$  ( $i = 1, \dots, N$ ). De esta manera,*

$$m(Q_0) - m(Q^*) = 2 \int_0^T Q^*(t) \delta Q dt + \int_0^T \delta^2 Q dt \quad (4.14)$$

y (4.12) llevan a

$$m(Q_0) - m(Q^*) = 2 \sum_{j=1}^N \alpha_j \int_0^T \delta Q g_j(r_0, t) dt + \int_0^T \delta^2 Q dt = \int_0^T \delta^2 Q dt > 0 \quad (4.15)$$

Así,  $m(Q_0) > m(Q^*)$ , y por lo tanto,  $Q^*$  es la solución de (3.22).

Después de emplear la regla de Cramer [26] para resolver el sistema lineal algebraico (4.13) y sustituir dicha solución en la fórmula (4.12), se encuentra que la expresión analítica para la tasa de descarga óptima es,

$$Q^*(t) = \sum_{j=1}^N \frac{\begin{vmatrix} \psi_{11} & \dots & c_1 & \dots & \psi_{1N} \\ \psi_{21} & \dots & c_2 & \dots & \psi_{2N} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \psi_{N1} & \dots & c_N & \dots & \psi_{NN} \end{vmatrix}}{|\Psi|} g_j(r_0, t) \quad (4.16)$$

Donde  $\Psi = (\psi_{ij})$  es la matriz cuadrada de  $N \times N$  del sistema (4.13) cuyas entradas son el producto interior de dos funciones en  $L_2(0, T)$ , es decir,

$$\psi_{ij} = \int_0^T g_i(r_0, t)g_j(r_0, t)dt, \quad 1 \leq i, j \leq N \quad (4.17)$$

y el determinante del numerador es  $|\Psi_j|$ . La matriz  $\Psi_j$  se obtiene de  $\Psi$  intercambiando su  $i$ ésima columna  $j$  con la correspondiente componente del vector de concentración crítica  $\vec{c} = (c_1, \dots, c_N)^t$ , o sea,

$$\Psi_j = \begin{pmatrix} \psi_{11} & \dots & c_1 & \dots & \psi_{1N} \\ \psi_{21} & \dots & c_2 & \dots & \psi_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_{N1} & \dots & c_N & \dots & \psi_{NN} \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

De la ecuación (4.17) se ve que la matriz  $\Psi$  es simétrica. Además,  $\Psi$  es también una matriz positiva semidefinida, por consiguiente

$$\vec{x}^t \Psi \vec{x} = \left\| \sum_{i=1}^N x_i g_i(r_0, t) \right\|^2 \geq 0, \quad (4.19)$$

para cualquier vector no nulo  $\vec{x} \in \mathbb{R}^N$ . En esta última desigualdad, se usa la norma en  $L_2(0, T)$ . Cuando las funciones adjuntas  $\{g_i(r_0, t)\}_{i=1}^N$  son linealmente independientes, la matriz  $\Psi$  es positiva definida y consecuentemente no singular, esto implica que  $Q^*$  en (4.16) está bien condicionada.

Del teorema 2,  $Q^*(t)$  es la tasa de descarga óptima solamente si es una función positiva en el intervalo  $(0, T)$ . Esta condición se satisface, cuando el vector de concentración crítica  $\vec{c} = (c_1, \dots, c_N)^t$  está en el cono convexo [8] formado por las columnas de la matriz  $\Psi$ . En esta circunstancia, todos los coeficientes  $\alpha_j$  ( $j = 1, \dots, N$ ) en (4.12)

son positivos. Este es el caso particular, en que las soluciones adjuntas  $\{g_i(r_0, t)\}_{i=1}^N$  son funciones ortogonales, esto es,  $\psi_{ij} = 0$ ,  $i \neq j$ , en consecuencia, la tasa de control óptimo esta dada por,

$$Q^*(t) = \sum_{j=1}^N \left\{ c_j / \int_0^T g_j^2(r_0, t) dt \right\} g_j(r_0, t) \quad (4.20)$$

Cabe advertir que no siempre la tasa óptima de suministro  $Q^*(t)$  responde a una interpretación física lógica. Esta falla sucede cuando el mínimo  $Q^*(t)$  de la funcional  $m(Q)$  se encuentra en las fronteras o fuera del conjunto de factibilidad  $\Theta$ . Recuérdese que los métodos variacionales funcionan para  $Q^* \in \Theta$ . De esta manera, si la hipótesis es correcta, una formulación discreta del problema variacional 1.1 (Capítulo 6), tendrá que predecir los mismos resultados que la fórmula analítica (4.16) para la tasa óptima.

---

## Capítulo 5

### SEPARACION DE OPERADORES EN EDAR

---

En este capítulo se presenta el método de separación de operadores, componente por componente, absolutamente estable de orden dos y simétrico, basado en el esquema de Crank-Nicholson, para aproximar la solución de la ecuación de advección-difusión-reacción (ADR) en las direcciones  $x$  y  $y$ . Se muestra que el modelo discreto en diferencias finitas es convergente y que satisface la ecuación de balance de masa.

#### 5.1. Esquema de Crank-Nicholson

Supóngase que la ecuación de evolución general,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + A\phi = f \quad \text{con} \quad \phi(0) = \phi^0, \quad (5.1)$$

contiene como casos particulares a los modelos de dispersión y su adjunto, donde se pide que  $\phi$ ,  $\phi^0$  y  $f$  sean funciones suficientemente suaves. Asimismo, se supone que el operador diferencial  $A$  fue discretizado en espacio, de manera que se tiene una matriz positiva-semidefinida (en la sección 2.3 del Capítulo 2, se demostró que el operador continuo  $A$  cumple esta propiedad).

Seleccione una malla en el eje del tiempo con tamaño de paso  $\tau > 0$  y nodos  $t_k = k\tau$ , para  $k = 0, 1 \dots M$ , ( $T = M \cdot \tau$ ). Expandiendo la función  $\phi$  en un polinomio

de Taylor centrado en  $t_{k+\frac{1}{2}}$ , se tiene

$$\phi(t_{k+1}) = \phi(t_{k+\frac{1}{2}}) + \frac{\tau}{2}\phi'(t_{k+\frac{1}{2}}) + \left(\frac{\tau}{2}\right)^2 \frac{\phi''(t_{k+\frac{1}{2}})}{2!} + \left(\frac{\tau}{2}\right)^3 \frac{\phi'''(\xi)}{3!} + \dots \quad (5.2)$$

y

$$\phi(t_k) = \phi(t_{k+\frac{1}{2}}) - \frac{\tau}{2}\phi'(t_{k+\frac{1}{2}}) + \left(\frac{\tau}{2}\right)^2 \frac{\phi''(t_{k+\frac{1}{2}})}{2!} - \left(\frac{\tau}{2}\right)^3 \frac{\phi'''(\eta)}{3!} + \dots \quad (5.3)$$

Combinando (5.2) y (5.3) se llega a las siguientes fórmulas discretas en diferencias finitas a segundo orden de aproximación, para la función  $\phi$  y su derivada  $\phi'$ .

$$\frac{\phi(t_{k+1}) - \phi(t_k)}{\tau} = \phi'(t_{k+\frac{1}{2}}) + o(\tau^2) \quad (5.4)$$

$$\frac{\phi(t_{k+1}) + \phi(t_k)}{2} = \phi(t_{k+\frac{1}{2}}) + o(\tau^2) \quad (5.5)$$

Despreciando los términos  $o(\tau^2)$  en las ecuaciones (5.4) y (5.5), la ecuación (5.1) se escribe en su versión discreta como

$$\frac{\phi^{k+1} - \phi^k}{\tau} + A^k \frac{\phi^{k+1} + \phi^k}{2} = f^{k+\frac{1}{2}} \quad (5.6)$$

O bien,

$$\begin{aligned} (I + \frac{\tau}{2}A^k)\phi^{k+1} &= (I - \frac{\tau}{2}A^k)\phi^k + \tau f^{k+\frac{1}{2}}, \quad k = 0, \dots, M-1, \\ \phi^0 &= \phi(0) \end{aligned} \quad (5.7)$$

El método para llegar a (5.7), se conoce como *esquema de Crank-Nicholson* a segundo orden de aproximación. Donde  $I$  es la matriz identidad,  $\phi^k$  denota la aproximación en el tiempo de  $\phi(t_k)$ ,  $f^{k+\frac{1}{2}}$  la correspondiente de  $f(t_{k+\frac{1}{2}})$  y  $A^k = A(t_{k+\frac{1}{2}})$ .

Obsérvese de la última ecuación (5.7), que el esquema es implícito. De igual manera, es importante notar que para calcular la aproximación de  $\phi$  en cada paso de tiempo, es necesario resolver un sistema lineal de ecuaciones algebraicas donde la matriz del sistema  $(I + \frac{\tau}{2}A^k)$  debe ser definida positiva (no singular), para asegurar la unicidad y existencia de la solución. Esta característica es esencial, también en los métodos de separación de operadores que se exponen más adelante.

Para probar la estabilidad de (5.7) respecto de pequeñas perturbaciones en la condición inicial y el forzamiento, se utiliza el siguiente teorema sobre la estimación de la norma.

**Teorema 3.** *Sea  $A$  una matriz  $N \times N$  positiva-semidefinida y un parámetro  $\sigma \geq 0$ , 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 lema, debemos observar lo siguiente:

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

desarrollando términos se llega a

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

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

Dividiendo la expresión (5.7) entre  $(I + \frac{\tau}{2}A^k)$  y renombrando  $S^k = (I + \frac{\tau}{2}A^k)^{-1}$  y  $T^k = (I + \frac{\tau}{2}A^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}A^k) = (I - \frac{\tau}{2}A^k)(I + \frac{\tau}{2}A^k)^{-1}$ , entonces

$$\phi^{k+1} = T^k \phi^k + \tau S^k f^{k+\frac{1}{2}} \quad (5.8)$$

En términos de su norma,

$$\|\phi^{k+1}\|_2 \leq \|T^k\|_2 \|\phi^k\|_2 + \tau \|S^k\|_2 \|f^{k+\frac{1}{2}}\|_2 \quad (5.9)$$

Por el teorema 3 y definiendo  $\|f\| = \max_j \|f^j\|_2$ , (5.9) toma la forma,

$$\|\phi^{k+1}\|_2 \leq \|\phi^k\|_2 + \tau \|f\| \quad (5.10)$$

Finalmente,

$$\|\phi^k\|_2 \leq \|\phi^0\|_2 + k\tau \|f\|, \quad \text{con } kj \leq T. \quad (5.11)$$

De la desigualdad (5.11) y por ser (5.8) un proceso lineal, la estabilidad incondicional de (5.7) se garantiza.

Según el Teorema de Convergencia de Lax, 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  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ , y  $\tau \rightarrow 0$  se cumple

$$|\phi_{ij}^k - \phi(\mathbf{r}_{ij}, t_k)| \rightarrow 0, \quad (5.12)$$

lo que implica la convergencia del esquema Crank-Nicholson.

La consistencia, estabilidad y convergencia del esquema asociado a (5.1), indican que sirve para resolver los modelos de dispersión y su adjunto. Sin embargo, este método requiere de un gran esfuerzo computacional para realizar (5.7). Como se sabe, siempre que se aplican diferencias finitas centradas de segundo orden en la discretización del operador diferencial sobre el dominio, en este caso  $D$ , se obtiene un sistema lineal de ecuaciones que tiene una matriz  $A$  tridiagonal por bloques, y donde cada bloque es a su vez otra matriz tridiagonal. La estructura de  $A$ , además de su dimensión igual al número de nodos considerados (que en general es un número grande), implican un alto tiempo de cómputo para resolver el sistema algebraico en (5.7). Para evitar esta dificultad computacional, se propone trabajar con un esquema de separación de operadores.

## 5.2. Separación de operadores componente por componente

Entre los métodos numéricos para tratar la ecuación (2.3) destacan aquellos que generan esquemas discretos que satisfacen el principio de conservación de la masa similar a la del caso continuo, y cuya implementación computacional es eficiente y

sencilla. La primera característica es indispensable para mantener el sentido físico del modelo, las restantes juegan un papel importante en problemas de gran escala (regiones en la atmósfera o el océano en donde se modelan procesos de dispersión de sustancias) que requieren ser resueltos lo antes posible, condición que demanda un esfuerzo computacional mínimo, con el fin de hacer predicciones en un tiempo razonable.

Una técnica muy utilizada en estos casos, se le conoce como *métodos de separación de operadores*, desarrollados por Godunov, Yanenko, Samarskii y Marchuk, entre otros [10]. Douglas, Peaceman y Rachford [4] los utilizaron, para reducir problemas computacionales de la física matemática a una cadena de problemas más simples que una computadora resolvería eficientemente. Originalmente fueron formulados y teóricamente justificados para operadores positivos-semidefinidos que conmutan.

Estos métodos, consisten en descomponer el operador que caracteriza al modelo en una suma de operadores con estructura más sencilla. Otro punto fundamental, es que permiten la discretización de la variable temporal en el modelo continuo, mientras que la discretización de las variables espaciales se realiza con técnicas de diferencias finitas o elemento finito. Es evidente por tanto, que una correcta combinación de discretización en espacio y tiempo es determinante para que el modelo discreto conserve las propiedades físicas del modelo continuo.

Existen diferentes esquemas en la separación de operadores. En lo que sigue, se describe el **método de separación componente por componente**, uno de los más importantes y aplicable no sólo a operadores que conmutan.

Tómese  $f=0$  en (5.1) y supóngase que el operador diferencial  $A$  fué aproximado por diferencias finitas en espacio, de manera que se tenga una matriz positiva-semidefinida.

Asumiendo que es posible descomponer  $A$  en dos matrices positivas-semidefinidas,  $A_1$  y  $A_2$ , tal que  $A = A_1 + A_2$  y como en general éstas dependen del tiempo, entonces su aproximación debe ser,

$$\Lambda_\alpha^k = A_\alpha(t_{k+\frac{1}{2}}), \quad \text{en } t_k \leq t \leq t_{k+1}, \quad \alpha = 1, 2, \quad (5.13)$$

para una malla en el tiempo como en la sección 5.1.

La aplicación sucesiva de Crank-Nicholson a los operadores  $A_1$  y  $A_2$ , resulta en el esquema,

$$\frac{\phi^{k+\frac{1}{2}} - \phi^k}{\tau} + \Lambda_1^k \frac{\phi^{k+\frac{1}{2}} + \phi^k}{2} = 0 \quad \text{y} \quad (5.14)$$

$$\frac{\phi^{k+1} - \phi^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} + \Lambda_2^k \frac{\phi^{k+1} + \phi^{k+\frac{1}{2}}}{2} = 0 \quad (5.15)$$

Luego de algunos pasos algebraicos, (5.14) y (5.15), se escriben en forma compacta como

$$\phi^{k+1} = T^k \phi^k, \quad (5.16)$$

donde

$$T^k = (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)(I + \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k) \quad (5.17)$$

Del teorema 3 se sigue  $\|T^k\|_2 \leq 1$ , esto implica que el esquema (5.14) y (5.15) es absolutamente estable (obsérvese que  $(I + \frac{\tau}{2}\Lambda_\alpha^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}\Lambda_\alpha^k) = (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_\alpha^k)(I +$

$\frac{\tau}{2}\Lambda_\alpha^k)^{-1}$ ,  $\alpha = 1, 2$ ). Utilizemos el siguiente lema, para demostrar la consistencia de este esquema.

**Lema 5.** *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,  $(I - T)\mathbf{x} = 0$  tiene solamente la solución trivial  $\mathbf{x} = 0$ , por lo que  $I - T$  es de rango máximo, es decir,  $I - T$  es no singular.*

*Para (ii) se observa que*

$$(I - T)S_m = I - T^{m+1}, \quad \text{donde } S_m = (I + T + T^2 + \dots + T^m)$$

*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 el inciso (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  $\varepsilon$  es arbitrario se tiene el resultado.

Para  $\tau$  suficientemente pequeño, se cumplen las desigualdades

$$\frac{\tau}{2} \|\Lambda_1^k\|_2 < \frac{1}{2} \quad y \quad \frac{\tau}{2} \|\Lambda_2^k\|_2 < \frac{1}{2}, \quad (5.18)$$

entonces, podemos escribir (Lema 5)

$$T^k = I - \tau\Lambda^k + \frac{\tau^2}{2} [(\Lambda_1^k)^2 + 2\Lambda_2^k\Lambda_1^k + (\Lambda_2^k)^2] - \dots, \quad (5.19)$$

o lo que es lo mismo, siempre que  $\Lambda_1^k\Lambda_2^k = \Lambda_2^k\Lambda_1^k$ ,

$$T^k = I - \tau\Lambda^k + \frac{\tau^2}{2} (\Lambda^k)^2 - \dots \quad (5.20)$$

La ecuación (5.20) muestra que el esquema (5.14)-(5.15) coincide con (5.7) hasta orden dos, de aquí se concluye que (5.14)-(5.15) es consistente. La convergencia se cumple por el Teorema de Lax.

La ventaja de utilizar separación de operadores es que la realización computacional de (5.14)-(5.15) es más sencilla que la de (5.7), 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 (5.14)-(5.15) implican la solución sucesiva de problemas unidimensionales con una estructura simple, esto es, sistemas algebraicos donde la matriz es tridiagonal de bajo orden, y por lo tanto de fácil solución.

La desventaja del esquema (5.14)-(5.15), esta en que los operadores  $\Lambda_1^k$  y  $\Lambda_2^k$  deben conmutar, cosa que no siempre sucede. Cuando los operadores no conmutan la aproximación sólo es a primer orden. Por esta razón, se analiza otro esquema aún más general.

Aproximando los operadores  $A_1$  y  $A_2$  en la variable temporal mediante

$$\Lambda_\alpha^k = A_\alpha(t_k), \quad \text{en } t_{k-1} \leq t \leq t_{k+1}, \quad (5.21)$$

entonces se tiene el nuevo esquema simétrico:

$$\frac{\phi^{k-\frac{1}{2}} - \phi^{k-1}}{\tau} + \Lambda_1^k \frac{\phi^{k-\frac{1}{2}} + \phi^{k-1}}{2} = 0 \quad (5.22)$$

$$\frac{\phi^k - \phi^{k-\frac{1}{2}}}{\tau} + \Lambda_2^k \frac{\phi^k + \phi^{k-\frac{1}{2}}}{2} = 0 \quad (5.23)$$

$$\frac{\phi^{k+\frac{1}{2}} - \phi^k}{\tau} + \Lambda_2^k \frac{\phi^{k+\frac{1}{2}} + \phi^k}{2} = 0 \quad (5.24)$$

$$\frac{\phi^{k+1} - \phi^{k+\frac{1}{2}}}{\tau} + \Lambda_1^k \frac{\phi^{k+1} + \phi^{k+\frac{1}{2}}}{2} = 0 \quad (5.25)$$

Combinando este conjunto de ecuaciones (5.22)-(5.25) se consigue

$$\phi^{k+1} = T^k \phi^{k-1}, \quad (5.26)$$

con

$$T^k = (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)(I + \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k) \times \quad (5.27)$$

$$(I + \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)(I + \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)^{-1}(I - \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k) \quad (5.28)$$

Desarrollando en serie de potencias la matriz  $T^k$  (Lema 5),

$$T^k = I - 2\tau A^k + \frac{(2\tau)^2}{2}(A^k)^2 - \dots, \quad (5.29)$$

donde  $A^k = A(t_k)$ . Como antes, esta última ecuación (5.29), implica que el esquema (5.22)-(5.25) coincide hasta orden dos con el esquema de Crank-Nicholson aplicado a (5.1) en el intervalo de tiempo  $t_{k-1} \leq t \leq t_{k+1}$ ,

$$\frac{\phi^{k+1} - \phi^{k-1}}{\tau} + A^k \frac{\phi^{k+1} + \phi^{k-1}}{2} = 0 \quad (5.30)$$

Por lo tanto (5.22)-(5.25) es absolutamente estable (Lema 5;  $\|T^k\|_2 \leq 1$ ), con aproximación a segundo orden, independientemente de la conmutabilidad de las matrices  $\Lambda_1^k$  y  $\Lambda_2^k$ . El Teorema de Lax garantiza la convergencia.

La generalización del esquema anterior (5.22)-(5.25), para el caso no-homogéneo del problema (5.1), esta dado por

$$\begin{aligned} (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)\phi^{k-\frac{1}{2}} &= (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)\phi^{k-1} \\ (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)(\phi^k - \tau f^k) &= (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)\phi^{k-\frac{1}{2}} \\ (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)\phi^{k+\frac{1}{2}} &= (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_2^k)(\phi^k + \tau f^k) \\ (I + \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)\phi^{k+1} &= (I - \frac{\tau}{2}\Lambda_1^k)\phi^{k+\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (5.31)$$

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

De manera análoga a la demostración anterior, se prueba que el esquema simétrico (5.31) es un método de aproximación de orden dos (absolutamente estable) para la ecuación (5.1). De esto se sigue que (5.31) es un esquema de solución numérica convergente.

### 5.3. Separación de operadores en la ecuación de transporte

Para aplicar correctamente el esquema (5.31) en los modelos de dispersión y su adjunto (modelos de transporte), definanse los operadores  $A_1$  y  $A_2$  que separan el fenómeno de transporte en las direcciones  $x$  y  $y$  respectivamente,

$$A_1\phi = \frac{1}{2}\sigma\phi + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u\phi) + \frac{1}{2}u\frac{\partial\phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial\phi}{\partial x}\right) \quad y \quad (5.32)$$

$$A_2\phi = \frac{1}{2}\sigma\phi + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial y}(v\phi) + \frac{1}{2}v\frac{\partial\phi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial\phi}{\partial y}\right) \quad (5.33)$$

Como  $\nabla \cdot \vec{U} = 0$ , entonces claramente se satisface

$$A = A_1 + A_2, \quad (5.34)$$

donde  $A$  representa tanto al operador diferencial de (2.3) como de (3.11),

$$A\phi = \vec{U} \cdot \nabla\phi + \sigma\phi - \nabla \cdot \mu\nabla\phi \quad (5.35)$$

Para mostrar que cada uno de estos operadores es positivo-semidefinido y sin pérdida de generalidad, supóngamos que el dominio  $D$  es el rectángulo  $[0, X] \times [0, Y]$ . De esta manera,

$$\int_0^X \phi A_1\phi dx = \frac{1}{2} \int_0^X \sigma\phi^2 dx + \int_0^X \mu \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 dx + \left[\frac{1}{2}\phi^2 u - \mu\phi\frac{\partial\phi}{\partial x}\right]_0^X \quad (5.36)$$

Aplicando las cuatro condiciones de frontera (2.5)–(2.6) en  $x = 0$  y  $x = X$ , es posible escribir el último término como,

$$\left[ \frac{1}{2} \phi^2 u - \mu \phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_0^X = \frac{1}{2} [\phi^2(X) \cdot |u(X)| + \phi^2(0) \cdot |u(0)|] \geq 0 \quad (5.37)$$

Puesto que los parámetros  $\sigma$  y  $\mu$  son positivos, entonces

$$(\phi, A_1 \phi)_{L_2(D)} = \int_0^Y \int_0^X \phi A_1 \phi \, dx \, dy \geq 0, \quad (5.38)$$

para toda función  $\phi$  que satisfaga las condiciones (2.5)–(2.6). Un argumento similar prueba que  $A_2$  también es un operador positivo-semidefinido.

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 (5.31) requiere que la discretización de las variables espaciales de cada operador diferencial preserven la propiedad anterior, esto significa que las matrices  $A_1$  y  $A_2$  deben ser también positivas-semidefinidas. Para conseguirlo se discretiza el dominio  $D$  usando diferencias finitas centradas de orden dos sobre una malla doble (tipo c) de Arakawa [11]. Las fórmulas de aproximación para cada término del operador  $A_1$  son,

$$\left( \frac{1}{2} \sigma \phi \right)_{ij} = \frac{1}{2} \sigma_{ij} \phi_{ij}, \quad (5.39)$$

$$\left( \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (u \phi) + \frac{1}{2} u \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{ij} \cong \frac{u_{i+\frac{1}{2}j} \phi_{i+1j} - u_{i-\frac{1}{2}j} \phi_{i-1j}}{2\Delta x}, \quad (5.40)$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \right)_{ij} \cong \mu \frac{\phi_{i+1j} - 2\phi_{ij} + \phi_{i-1j}}{\Delta x^2}, \quad (5.41)$$

donde  $\Delta x > 0$  es el tamaño de paso para la discretización en la dirección  $x$ . La discretización del operador  $A_2$  en la dirección  $y$  es similar.

Las ecuaciones (5.39) y (5.41) son aproximaciones bien conocidas de orden dos. La fórmula (5.40) necesita una explicación;

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x}(u\phi) + \frac{1}{2} u \frac{\partial \phi}{\partial x} = u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{1}{2} \phi \frac{\partial u}{\partial x} \quad (5.42)$$

Cuando aproximamos cada factor del lado derecho en (5.42) con una diferencia finita centrada de orden dos (o un promedio centrado de orden dos), tenemos

$$\begin{aligned} \left( \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x}(u\phi) + \frac{1}{2} u \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{ij} &= \frac{u_{i+\frac{1}{2}j} + u_{i-\frac{1}{2}j}}{2} \cdot \frac{\phi_{i+1j} - \phi_{i-1j}}{2\Delta x} + \\ &\quad \frac{\phi_{i+1j} + \phi_{i-1j}}{2} \cdot \frac{u_{i+\frac{1}{2}j} - u_{i-\frac{1}{2}j}}{2\Delta x} \end{aligned} \quad (5.43)$$

Simplificando se obtiene (5.40).

A continuación se demuestra que los correspondientes operadores discretos son positivos-semidefinidos. Partiendo de,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N (A_1 \phi_{ij}) \phi_{ij} &= \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_{ij}}{2} \phi_{ij}^2 + \frac{\mu}{\Delta x^2} \sum_{i=1}^{N-1} (\phi_{ij} - \phi_{i+1j})^2 + \frac{\mu}{\Delta x^2} (\phi_{1j}^2 + \phi_{Nj}^2) + \\ &\quad \frac{1}{2\Delta x} \left( u_{N+\frac{1}{2}j} \phi_{Nj} \phi_{N+1j} - u_{\frac{1}{2}j} \phi_{0j} \phi_{1j} \right) - \\ &\quad \frac{\mu}{\Delta x^2} (\phi_{Nj} \phi_{N+1j} + \phi_{0j} \phi_{1j}) \cdots \end{aligned} \quad (5.44)$$

Luego de aplicar los cuatro casos discretos de las condiciones de frontera (2.5)–(2.6) en  $x = 0$  y  $x = X$ ,

$$\sum_{i=1}^N (A_1 \phi_{ij}) \phi_{ij} = \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_{ij}}{2} \phi_{ij}^2 + \frac{\mu}{\Delta x^2} \sum_{i=1}^{N-1} (\phi_{ij} - \phi_{i+1j})^2 + \frac{1}{2\Delta x} \left( |u_{N+\frac{1}{2}j}| \phi_{Nj}^2 + |u_{\frac{1}{2}j}| \phi_{1j}^2 \right) \quad (5.45)$$

Como cada término en la última ecuación es positivo, sumamos sobre  $j$ , para concluir

$$(A_1 \phi, \phi) = \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N (A_1 \phi_{ij}) \phi_{ij} \geq 0, \quad (5.46)$$

donde  $\phi \in \mathfrak{R}^{N+M}$  y satisface las condiciones de frontera discretas (2.5)–(2.6).

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

Con la seguridad de que los operadores  $A_1$  y  $A_2$  son positivos semidefinidos, se aplica el esquema de solución numérica (5.31) 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), que fueron discretizados con fórmulas de diferencias finitas centradas con tres puntos.

Existen varios métodos para resolver sistemas tridiagonales [14], entre los más usados esta el de factorización, éste es computacionalmente económico (es rápido y requiere poca memoria). Consúltese apéndice B.

## 5.4. Ecuación discreta de balance de masa

Como se demuestra a continuación, los modelos discretos, son consistentes con la ecuación continua de balance de masa hasta segundo orden de aproximación. En el apéndice B, se pueden encontrar ejemplos de salida numéricos que ilustran esta situación. Obsévese que

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Delta x} \sum_{i=1}^N \left( u_{i+\frac{1}{2}j} \phi_{i+1j} - u_{i-\frac{1}{2}j} \phi_{i-1j} \right) &= \frac{1}{\Delta x} \left( u_{N+\frac{1}{2}j} \phi_{N+\frac{1}{2}j} - u_{\frac{1}{2}j} \phi_{\frac{1}{2}j} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \phi_{ij} \left( \frac{u_{i+\frac{1}{2}j} - u_{i-\frac{1}{2}j}}{\Delta x} \right) \end{aligned} \quad (5.47)$$

Partiendo de (5.47) y con base en las condiciones de frontera discretas (2.5)–(2.6), probemos que para  $A_1$ ,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N A_1 \phi_{ij} &= \sum_{i,j} \frac{\sigma_{ij}}{2} \phi_{ij} + \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=1}^M \left( \delta_{N+\frac{1}{2}j} |u_{N+\frac{1}{2}j}| \phi_{N+\frac{1}{2}j} + \delta_{\frac{1}{2}j} |u_{\frac{1}{2}j}| \phi_{\frac{1}{2}j} \right) - \\ &\quad \frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi_{ij} \left( \frac{u_{i+\frac{1}{2}j} - u_{i-\frac{1}{2}j}}{\Delta x} \right), \end{aligned} \quad (5.48)$$

donde

$$\delta_{N+\frac{1}{2}j} = \begin{cases} 1, & \text{si } u_{N+\frac{1}{2}j} \geq 0, \\ 0, & \text{si } u_{N+\frac{1}{2}j} < 0. \end{cases} \quad \text{y} \quad \delta_{\frac{1}{2}j} = \begin{cases} 0, & \text{si } u_{\frac{1}{2}j} \geq 0, \\ 1, & \text{si } u_{\frac{1}{2}j} < 0. \end{cases} \quad (5.49)$$

De igual manera para  $A_2$ ,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N A_2 \phi_{ij} &= \sum_{i,j} \frac{\sigma_{ij}}{2} \phi_{ij} + \frac{1}{\Delta y} \sum_{i=1}^N \left( \delta_{iM+\frac{1}{2}} \left| v_{iM+\frac{1}{2}} \right| \phi_{iM+\frac{1}{2}} + \delta_{i\frac{1}{2}} \left| v_{i\frac{1}{2}} \right| \phi_{i\frac{1}{2}} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi_{ij} \left( \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} \right) \end{aligned} \quad (5.50)$$

Si

$$(\nabla \cdot \mathbf{U})_{ij} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} = 0, \quad (5.51)$$

entonces,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N A \phi_{ij} &= \sum_{i,j} \sigma_{ij} \phi_{ij} + \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=1}^M \left( \delta_{N+\frac{1}{2},j} \left| u_{N+\frac{1}{2},j} \right| \phi_{N+\frac{1}{2},j} + \delta_{\frac{1}{2},j} \left| u_{\frac{1}{2},j} \right| \phi_{\frac{1}{2},j} \right) + \\ &\quad \frac{1}{\Delta y} \sum_{i=1}^N \left( \delta_{iM+\frac{1}{2}} \left| v_{iM+\frac{1}{2}} \right| \phi_{iM+\frac{1}{2}} + \delta_{i\frac{1}{2}} \left| v_{i\frac{1}{2}} \right| \phi_{i\frac{1}{2}} \right), \end{aligned} \quad (5.52)$$

donde los últimos términos determinan el flujo de masa a través de la frontera  $S$ , y se denotan por  $\Psi$ .

Por otra parte, el esquema numérico (5.31) representa, a segundo orden de aproximación, la realización del método de Crank-Nicholson en el intervalo  $t_{k-1} \leq t \leq t_{k+1}$ ,

$$\frac{\phi_{ij}^{k+1} - \phi_{ij}^{k-1}}{2\tau} + A^k \frac{\phi_{ij}^{k+1} + \phi_{ij}^{k-1}}{2} = f_{ij}^k \quad (5.53)$$

Sumando sobre los subíndices  $j$  e  $i$ , se tiene la ecuación de balance de masa discreta

$$\frac{1}{2\tau} \left( \sum_{i,j} \phi_{ij}^{k+1} - \sum_{i,j} \phi_{ij}^{k-1} \right) = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \sum_l Q_l^k - \sum_{i,j} \sigma_{ij}^k \phi_{ij}^k - \Psi^k, \quad (5.54)$$

ésta dice que la variación de la masa en un intervalo de longitud  $2\tau$  es igual a la masa que ingresa a  $D$  por las fuentes puntuales, menos la pérdida de masa debido a los fenómenos de transformación química y flujo a través de la frontera. Esto confirma que ambas ecuaciones de balance de masa, discreta (5.54) y continua (2.18) coinciden hasta orden dos de aproximación.

---

## Capítulo 6

### SOLUCION NUMERICA Y UNA APLICACION

---

En este capítulo, se discretiza el problema variacional 1.1 del Capítulo 1 y se reduce el modelo de dispersión adjunto tridimensional al caso bidimensional. También se da un ejemplo de aplicación, en el cual se calcula la tasa de descarga óptima con ambas formulaciones; analítica y discreta. En esta última se utilizó la rutina *lsqlin* de MATLAB®.

#### 6.1. Discretización del modelo variacional

La fórmula del punto medio para integrales, aplicada a 1.1, conduce al problema de optimización cuadrática en  $\mathbb{R}^L$ ,

$$\begin{aligned} \text{Minimizar} \quad & m(Q_1, \dots, Q_L) = \Delta t \sum_{l=1}^L Q_l^2 \\ \text{sujeto a} \quad & Q_l \geq 0, \quad (l = 1, \dots, L) \quad \text{y} \\ & \sum_{l=1}^L Q_l g_{il} = \frac{c_i}{\Delta t}, \quad (i = 1, \dots, N) \end{aligned} \tag{6.1}$$

donde  $\Delta t = T/L$ ,  $t_l = l \cdot \Delta t$ ,  $Q_l = Q(t_{l-1/2})$  y  $g_{il} = g_i(r_0, t_{l-1/2})$ ;  $(l = 0, \dots, L)$ .

La existencia de la solución en (6.1) se sigue de la continuidad de la funcional  $m(\vec{Q})$ ; ( $\vec{Q} = (Q_1, \dots, Q_L)$ ) sobre el conjunto de factibilidad  $\Phi$  que es un conjunto compacto en  $\mathbb{R}^L$  [8].

$$\Phi = \left\{ \begin{array}{l} \vec{Q} \in \mathbb{R}^L \\ Q_l \geq 0, \quad (l = 1, \dots, L) \end{array} \right. \quad \text{y} \quad \left. \begin{array}{l} \sum_{l=1}^L Q_l g_{il} = \frac{c_i}{\Delta t} \\ (i = 1, \dots, N) \end{array} \right\} \quad (6.2)$$

Por ser  $m(\vec{Q})$  y el conjunto  $\Phi$  estrictamente convexos, la unicidad de la solución queda garantizada [8]. Además, debido a que el conjunto de factibilidad  $\Phi$  es no vacío, el problema (6.1) tiene solución única  $(\vec{Q}^*)^T = (Q_1^*, \dots, Q_L^*)$ .

Para calcular la solución óptima, se utiliza la rutina de optimización numérica *lsqlin* de MATLAB®. Los coeficientes  $g_{il}$  se obtienen numéricamente (por el método de separación de operadores por componentes y el esquema de Crank-Nicholson descrito en [3]) del modelo adjunto (3.11)-(3.18) para cada zona  $\Omega_i$ .

## 6.2. Modelo de dispersión adjunto en 2D

Como se mencionó al inicio, resolver la ecuación de advección - difusión (2.1) es complicado, aún por técnicas de aproximación numéricas y se complica todavía, si se trabaja en tres direcciones espaciales  $x$ ,  $y$  y  $z$ , además de la variable temporal  $t$ . Por esta razón, se considera la concentración puntual  $\varphi$  del limpiador, como un promedio que depende de la altura  $z = H$ , sobre cualquier columna paralela en la dirección del eje  $z$ . De esta manera, el problema se restringe a considerar la variación espacial de la concentración sólo en las coordenadas  $x$  y  $y$ .

Considérese un medio acuático de profundidad constante  $H$  y fondo plano, en donde la velocidad del fluido en la componente  $w = 0$  y el resto de los parámetros constantes. Bajo estas suposiciones la ecuación de transporte (2.3), para este sistema se escribe en la forma,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + \sigma \phi - \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) - v_s \frac{\partial \phi}{\partial z} = f(r, t), \quad (6.3)$$

Integrando (6.3) sobre la componente vertical  $H$ ,

$$Q(t) \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \int_0^H \delta(z - z_0) dz = I_1 + I_2 + I_3; \quad (6.4)$$

$$I_1 = \frac{\partial}{\partial t} \int_0^H \phi dz + u \frac{\partial}{\partial x} \int_0^H \phi dz + v \frac{\partial}{\partial y} \int_0^H \phi dz + \sigma \int_0^H \phi dz \quad (6.5)$$

$$I_2 = -\frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial}{\partial x} \int_0^H \phi dz \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial}{\partial y} \int_0^H \phi dz \right) \quad (6.6)$$

$$I_3 = -\int_0^H \phi \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) dz - \int_0^H \frac{\partial}{\partial z} (v_s \phi) dz \quad (6.7)$$

Pero,

$$\int_0^H \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) dz = \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_0^H = \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} (H) - \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} (0) = \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} (H) \quad (6.8)$$

De la condición de frontera en  $S_B$ ,

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial n} \Big|_{z=0} = 0 \Rightarrow \mu \nabla \phi \cdot \vec{n} = -\mu \frac{\partial \phi}{\partial z} = 0 \Big|_{z=0} \quad (6.9)$$

Si  $v_s = 0$  en  $z = 0$ , entonces,

$$\int_0^H \frac{\partial}{\partial z} (v_s \phi) dz = v_s \phi \Big|_0^H = v_s \phi (H) - v_s \phi (0) = v_s \phi (H) \quad (6.10)$$

Por otro lado de la condición de frontera en  $S_T$ ,

$$-(-v_s \phi k) \cdot \hat{n} + \mu \nabla \hat{\phi} \cdot \hat{n} = -\zeta \phi, \quad (6.11)$$

de donde,

$$v_s \phi + \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_{z=H} = -\zeta \phi(H) \Big|_{z=H} \quad (6.12)$$

$$\therefore - \int_0^H \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) dz - \int_0^H \frac{\partial}{\partial z} (v_s \phi) dz = \zeta \phi \Big|_{z=H} = 0 \quad (6.13)$$

Si  $\zeta = 0$ , la sedimentación no influye, pues queda sobre la columna.

Bidimensionalmente y sobre una columna de altura  $H$ , el forzamiento viene dado por  $f(r, t) = \frac{Q(t)}{H} \delta(x - x_0) \delta(y - y_0)$ , así, la ecuación (6.3) toma la forma,

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + v \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \sigma \varphi - \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) = \frac{Q(t)}{H} \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \quad (6.14)$$

Se define la concentración promedio  $\varphi$  en una columna de altura  $H$  como,

$$\varphi = \frac{1}{H} \int_0^H \phi dz \quad (6.15)$$

Las condiciones iniciales  $\varphi^0 = 0$ , para un antibiótico, llevan a reescribir (6.15) de la siguiente manera,

$$\varphi(r, 0) = \varphi^0(r) = \frac{1}{H} \int_0^H \phi^0(r) dz \quad \text{en } D \quad (6.16)$$

Siendo las condiciones de frontera,

$$\mu \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} - U_n \varphi = 0 \quad \text{en } S^- \quad (6.17)$$

$$\mu \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{en } S^+ \quad (6.18)$$

Calculemos el promedio en  $[T - \tau, T]$  sobre una zona  $\Omega \in R_i^2$ , entonces,

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{|\Omega|\tau} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \varphi dx dy dt = \frac{1}{|\Omega|\tau} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \frac{1}{H} \int_0^H \phi(r, t) dz dx dy dt \\ &= \frac{1}{|\Omega|\tau H} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \int_0^H \phi(r, t) dz dx dy dt = \frac{1}{|v|\tau} \int_{T-\tau}^T \int_v \phi d\vec{r} dt \end{aligned} \quad (6.19)$$

Como antes  $J$  representa la concentración promedio en una zona  $V = \Omega \times [0, H]$ , para la tasa  $Q(t)$  del problema tridimensional.

El adjunto para el problema de dispersión bidimensional es,

$$-\frac{\partial g}{\partial t} - \vec{U} \cdot \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot (\mu \nabla g) = p(r, t) \quad (6.20)$$

$$g(r, T) = 0 \quad \text{en } D \quad (6.21)$$

$$\mu \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{sobre } S^- \quad (6.22)$$

$$\mu \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{n}} + U_n \varphi = 0 \quad \text{sobre } S^+ \quad (6.23)$$

Donde

$$p(r, t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau |\Omega|}, & r \in \Omega \text{ y } t \in (T - \tau, T) \\ 0, & \text{en otro lado} \end{cases} \quad (6.24)$$

De acuerdo con esto, el principio de dualidad es ahora,

$$J = \frac{1}{|\Omega|\tau} \int_{\Omega} \int_{T-\tau}^T \varphi dt dx dy = \int_D g(r, 0) \varphi^0(r) dr + \int_0^T \frac{Q(t)}{H} g(x_0, y_0, t) dt \quad (6.25)$$

Recordando que  $\varphi^0 = 0$ , entonces,

$$J = \frac{1}{|\Omega|\tau} \int_{\Omega} \int_{T-\tau}^T \varphi dt dx dy = \int_0^T \frac{Q(t)}{H} g(x_0, y_0, t) dt \quad (6.26)$$

Pero  $J$  es el promedio tridimensional buscado,

$$J = \frac{1}{|v|\tau} \int_v \int_{T-\tau}^T \phi dt d\vec{r} = \frac{1}{H} \int_0^T Q(t) g(x_0, y_0, t) dt \quad (6.27)$$

De esta manera, la tasa de descarga que ajuste a concentraciones requeridas en  $V = \Omega \times [0, H]$ , debe ser,

$$J_0 = \frac{1}{H} \int_0^T Q(t) g(x_0, y_0, t) dt \quad (6.28)$$

### 6.3. Remediaci3n de un canal contaminado por zonas zonas

Consid3rese un canal de dimensiones, 120 m de largo, 10 m de ancho y  $H = 4$  m de profundidad con  $N = 3$  zonas contaminadas  $\Omega_i$ . Las zonas son:  $\Omega_1 = [20, 30] \times [9, 10] \times H$ ,  $\Omega_2 = [70, 80] \times [9, 10] \times H$  y  $\Omega_3 = [95, 100] \times [0, 2] \times H$ . V3ase la figura 6.1.

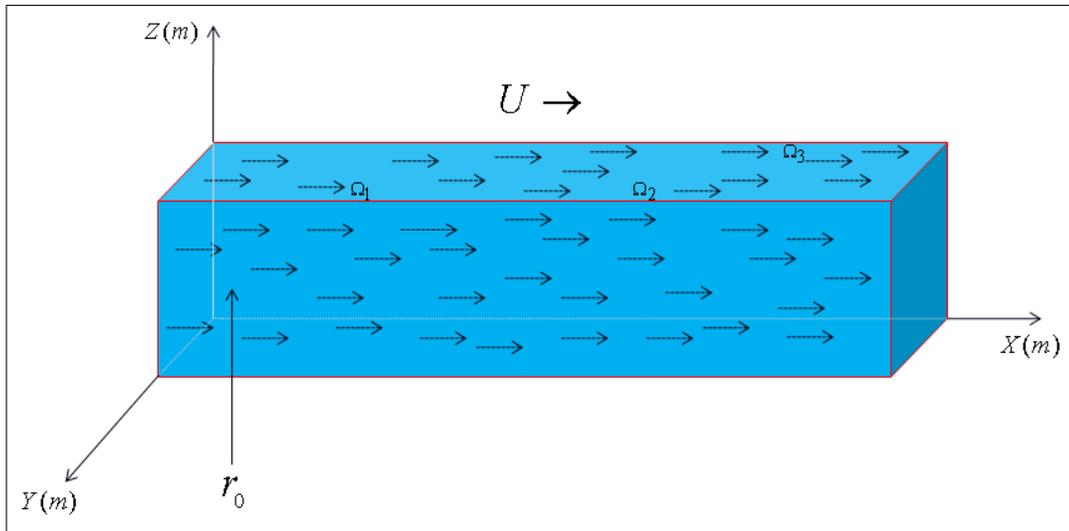


Figura 6.1: Canal de agua.

Los par3metros en el modelo adjunto de dispersi3n (3.11)-(3.17), toman los siguientes valores:  $\vec{U} = 30\vec{i}\text{mh}^{-1}$ ,  $\mu = 6 \text{ m}^2\text{h}^{-1}$ ,  $\sigma = 1 \text{ h}^{-1}$  y  $\zeta = \nu_s = 0$ . La descarga se hace desde el punto  $r_0 = (3, 2.2, 2)$ , durante el intervalo de tiempo  $[0, 4\text{hr}]$ . La concentraci3n promedio se controla para la 3ltima hora  $[3, 4]$ ; ( $\tau = 1\text{hr}$ ). Recu3rdese que  $\tau$  es el tiempo que se mantendr3 la concentraci3n antes de desvanecerse. El experimento se realiza para siete escenarios ( $k = \text{N3mero de experimento} = 7$ ), en los que las concentraciones cr3ticas  $c_i$  ( $\text{gm}^{-3}$ ) varian seg3n el cuadro 6.1.

$k$	1	2	3	4	5	6	7
$c_1$	0.8	1.0	0.5	1.2	0.6	0.6	1.5
$c_2$	0.8	0.8	1.0	0.5	1.2	0.6	0.6
$c_3$	0.8	0.5	1.5	1.2	0.6	1.5	0.6

Cuadro 6.1: Concentración crítica de cloro  $c_i$  gr/m<sup>3</sup> en la  $i$ -ésima zona.

### 6.3.1. Resultados y discusión

Los resultados de las simulaciones que se presentan, corresponden al experimento número siete. Las gráficas de la figura 6.2, son las funciones  $g_i(r_0, t)$  por zonas, que se obtienen al resolver el modelo adjunto de dispersión. Estas funciones, físicamente no tienen sentido, pero son una herramienta matemática que dan un bosquejo de la "concentración" en función de las coordenadas de donde proviene. La misma figura, muestra el intervalo de tiempo en horas en que cada zona alcanza su máxima concentración. Para la zona  $\Omega_3$  esto ocurre en la primera hora y media, seguida de la zona  $\Omega_2$  en las dos primeras horas y en la última hora y media lo hace la zona  $\Omega_1$ . Este orden es lógico, tomando en cuenta que cuando el limpiador comienza a fluir es llevado por la circulación del agua hacia las zonas más lejanas, antes de concentrarse en las más cercanas al punto de suministro. En la figura 6.3, se tienen las correspondientes isolíneas de concentración de la función adjunta en las direcciones  $x$  y  $y$  durante las cuatro horas. Las verdaderas isolíneas de la función de concentración  $\phi$ , se muestran en la figura 6.4 a intervalos de una hora, en las cuales se aprecia como se va dando el proceso de dispersión del limpiador en tiempo y espacio. Nótese que transcurrida la segunda hora ya se tiene la concentración de 0.6 gr/m<sup>3</sup>. A partir de este momento, ésta se mantiene constante hasta las dos últimas

horas que tarda en darse una concentración muy cercana ( $1.9 \text{ gr/m}^3$ ) a  $1.5 \text{ gr/m}^3$ . Esto indica que las concentraciones se alcanzan prácticamente en las dos últimas horas, ocurriendo primero (como se comentó anteriormente), para las zonas más alejadas del punto de distribución.

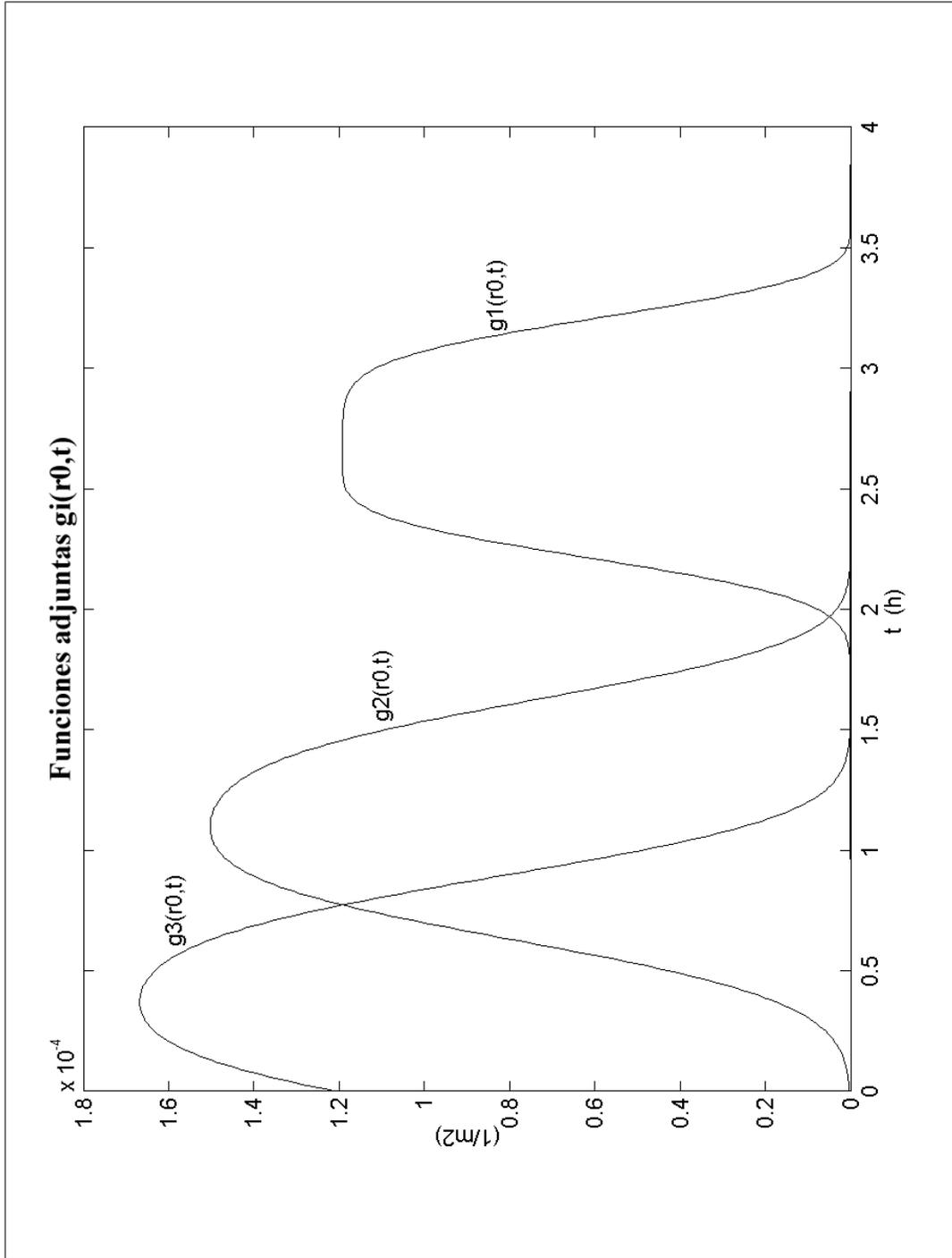


Figura 6.2: Funciones adjuntas restringidas al punto de descarga  $r_0$ , correspondiente a la simulación  $k = 7$ .

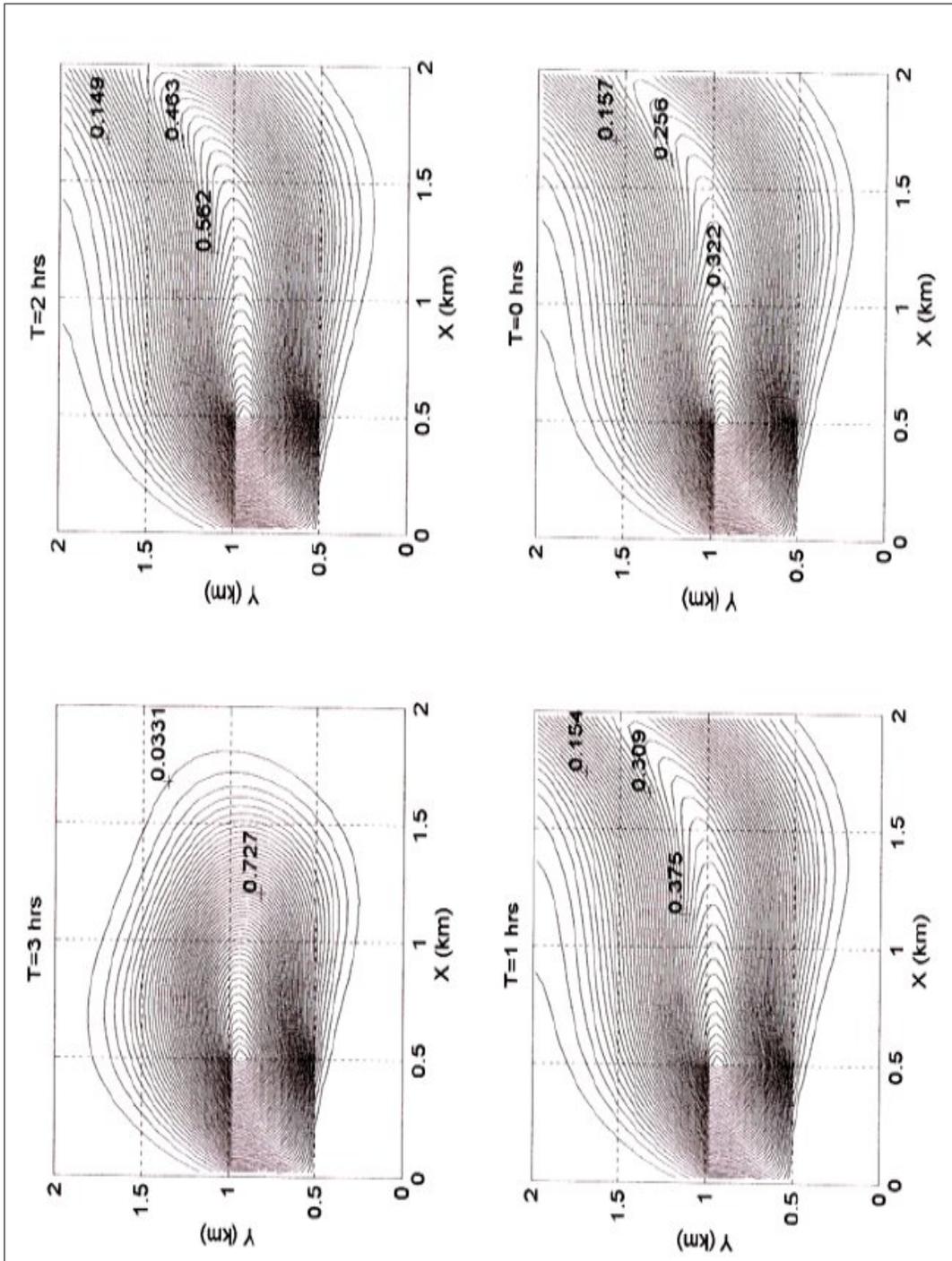


Figura 6.3: Isolíneas de concentración del modelo adjunto, para  $k = 7$ .

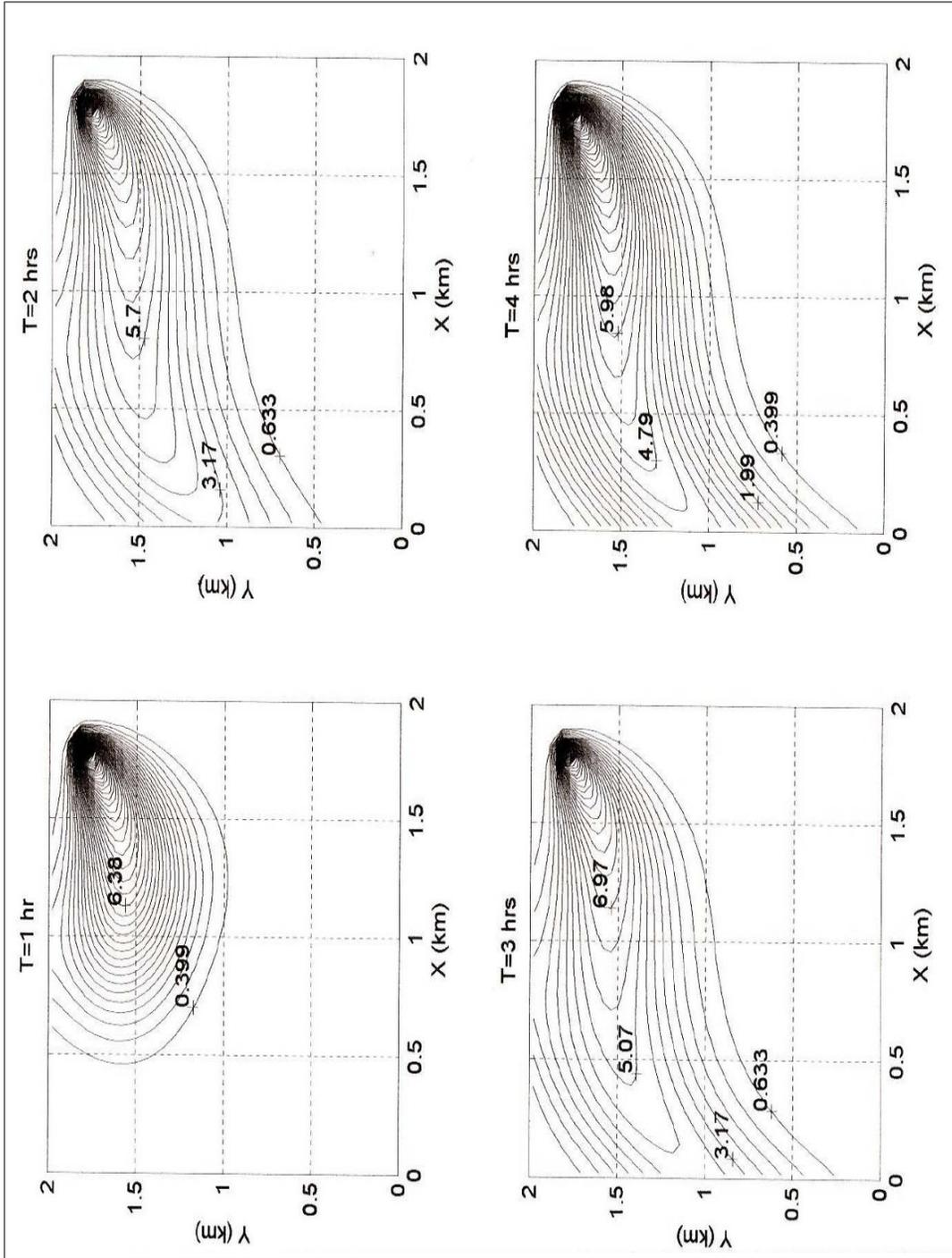


Figura 6.4: Isolneas de concentraci3n  $\phi$ , para el experimento  $k = 7$ .

En la figura 6.5, se muestran las tasas óptimas de suministro  $Q_k^*$  en gr/hr de cada experimento, calculadas con la ecuación analítica (4.16). Adviértase que todas son físicamente aceptables por ser positivas en el intervalo de tiempo que va de cero a cuatro horas. También se deduce de esta figura, que la última hora y media es crucial para alcanzar las concentraciones críticas por zona. Estos resultados se verificaron resolviendo numéricamente (6.1), con  $L = 400$ , donde se utilizó la rutina *lsqlin* de MATLAB®. Es importante notar la ventaja de la ecuación (4.16), ya que para calcular  $Q_k^*$  ( $k = 1, 2, 3, \dots, 7$ ), sólo se resolvieron sistemas lineales con la matriz  $\Psi_{3 \times 3}$  simétrica, positiva definida y bien condicionada ( $\text{cond}(\Psi) = 2.35$ ), mientras que la formulación (6.1) requirió resolver problemas de programación cuadrática con  $L = 400$  variables. Sin embargo, no siempre es posible aplicar (4.16) para obtener la tasa de descarga óptima y evitar el trabajo computacional requerido al tratar el problema (6.1). Esta situación particular aparece con las concentraciones críticas  $c_1 = c_3 = 0.8 \text{ gm}^{-3}$  y  $c_2 = 0.2 \text{ gm}^{-3}$ . Como se puede constatar en la figura 6.6, la fórmula (4.16) proporcionó una función errónea  $q_e$  que físicamente no puede ser la tasa de descarga óptima, pues toma valores negativos entre  $t = 1\text{hr}$  y  $t = 2\text{hr}$ . En cambio, la solución del problema de programación cuadrática (6.1) determinó correctamente la tasa óptima  $q_{opt}$  a través de la rutina *lsqlin* con  $L = 400$  variables.

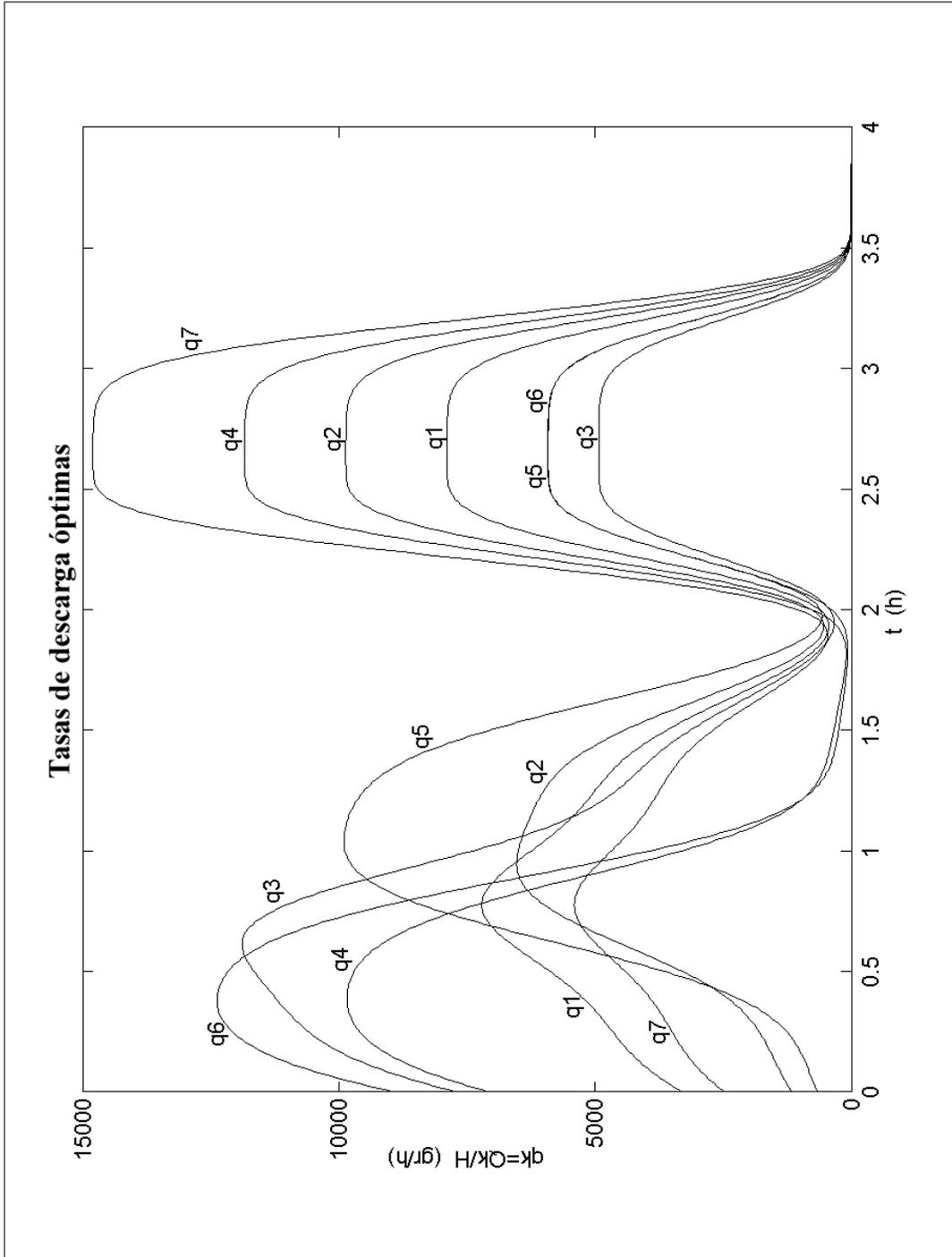


Figura 6.5: Tasas de descarga óptimas en gr/hr calculadas con la ecuación analítica (4.16).

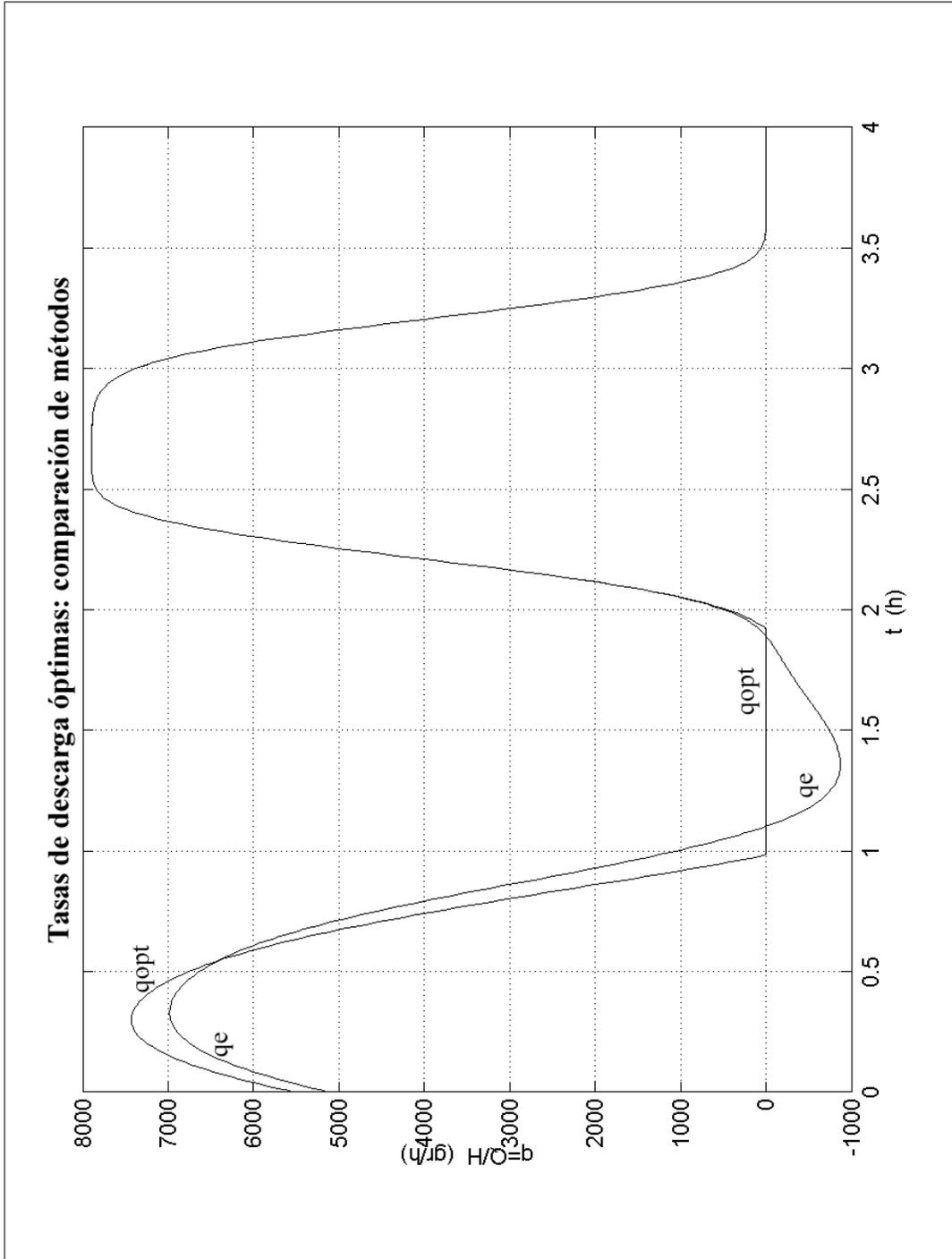


Figura 6.6: Comparación de la tasa de descarga óptima  $q_{opt}$  que se obtiene al resolver (6.1) para las concentraciones críticas  $c_1 = c_3 = 0.8 \text{ gm}^{-3}$  y  $c_2 = 0.2 \text{ gm}^{-3}$  con la función errónea  $q_e$  que proporciona (4.16).

---

## Capítulo 7

### CONCLUSIONES

---

En este trabajo, se analiza un problema de control óptimo (PC); el desarrollo matemático basado en la teoría del cálculo de variaciones es particularmente adecuado para encontrar analíticamente el mínimo de la funcional correspondiente al PC. Este mínimo  $Q^*(t)$ , representa la cantidad de masa por unidad de tiempo, del limpiador que se suministra en un medio acuoso, para alcanzar ciertas concentraciones críticas  $J_i(\phi)$  en determinadas zonas de interés  $\Omega_i$ . Algunos resultados reelevantes son los siguientes:

La solución  $Q^*$  tiene sentido físico sólo si es una función positiva para todo tiempo  $t$ . La tasa óptima de suministro dada por  $Q^*(t)$  es una combinación lineal de las funciones adjuntas  $g_i$ .

Las  $N$  soluciones adjuntas  $g_i$  forman un conjunto de funciones linealmente independiente, lo que permite invertir el sistema lineal asociado para calcular los multiplicadores de Lagrange en el PC, consecuentemente la matriz  $\Psi$  del sistema siempre es positiva definida y no singular, por lo tanto  $Q^*$  esta bien condicionada.

En cambio si los parámetros de control toman valores negativos ( $\gamma_j < 0$  para algún índice  $j$ ), entonces no hay solución al PC y cuando  $\gamma_i = 0$  la solución es  $Q^* \equiv 0$ .

El PC tiene solución y es única siempre y cuando el punto de descarga  $r_0$  se elija evitando simetrías geométricas y dinámicas para dos o más zonas distintas  $\Omega_i$  y  $\Omega_k$ . Lo mismo sucede cuando  $g_i(r_0, t) > 0$  en algún intervalo abierto  $I_i \subset (0, T)$ . Este último resultado indica que si desde el punto  $r_0$ , es posible alcanzar las  $N$  zonas contaminadas, entonces se puede construir una tasa de suministro  $Q^*(t)$  de mínimo costo. En otras palabras, cuando existen simetrías o  $g_i(r_0, t) < 0$ , el conjunto de factibilidad  $\Theta$  es vacío y por lo tanto PC no tiene solución.

Cuando el mínimo  $Q^*$  está fuera o en las fronteras del conjunto de factibilidad  $\Theta$ , los métodos variacionales fallan y  $Q^* < 0$ . En este caso  $Q^*$  se calcula numéricamente con ayuda de la rutina *lsqlin* de MATLAB®.

La ecuación de transporte tridimensional para modelar la dispersión del limpiador es demasiado complicada, por esta razón, se reduce el problema a dos dimensiones, para poder hacer una estimación de la concentración del limpiador  $\phi$  en la dirección  $z$ . El modelo adjunto de dispersión, resultó ser una buena herramienta para desligar  $Q(t)$  de la variable de estado  $\phi$ , a su vez, esto sirvió para calcular de manera relativamente sencilla la funcional  $J_i(\phi)$ .

Los esquemas numéricos implementados, todos estables a segundo orden de aproximación, mostraron ser eficientes desde el punto de vista computacional. El método de factorización para resolver matrices tridiagonales, derivadas del esquema de separación de operadores basado en Crank-Nicholson, es rápido en el tiempo de proceso de los cálculos, requiere poca memoria y la programación del algoritmo, en este caso en MATLAB®, no fue complicado. En relación al número de nodos considerados, la única limitante es la capacidad del equipo de cómputo con el que se cuente.

Un ejemplo resuelto con la formulación analítica y por métodos numéricos, muestra que la función  $Q^*$  cumple con los objetivos para los que fue diseñada. Este ejemplo también muestra la ventaja de la metodología analítica, en donde sólo se resolvieron sistemas lineales con la matriz  $\Psi_{3 \times 3}$  simétrica, positiva definida y bien condicionada ( $\text{cond}(\Psi) = 2.35$ ), sobre la numérica que implicó resolver un problema de programación cuadrática con  $L = 400$  variables, que requiere en promedio un tiempo de cómputo de  $T_c = 5$  minutos en equipos con un mínimo de 2GB en memoria RAM y velocidad del procesador de 1.60GHz.

La teoría va más allá del ejemplo ilustrativo dado, cuyos resultados permitieron corroborar el marco teórico hasta ahora desarrollado. Otras simulaciones utilizando diversos parámetros en el modelo adjunto, hubieran permitido hacer un análisis comparativo entre las  $Q^*$  resultantes. Desafortunadamente, por tiempos y plazos que se deben cumplir administrativamente esto no fue posible. No obstante, se espera que trabajos futuros continúen esta línea de investigación y se concluyan esta y otras tareas pendientes que destacan por su importancia: incluir en el modelo las características específicas del microorganismo contaminante, en particular se está interesado en los biofilm, así como introducir las propiedades de un químico limpiador en particular, tomar en cuenta el tiempo de respuesta del limpiador sobre éstos organismos sin sobrepasar las normas permitidas de concentración del químico, considerar distintas geometrías de la región acuática y por último aplicar a una situación real, entre otras.

Aunque existen varias formas de remover microorganismos biológicos contaminantes (un ejemplo son los biofilms), se opta en este trabajo por una química, tomando en cuenta que técnicas mecánicas, funcionan provocando fuertes turbu-

lencias para arrancar placas enteras de la superficie y arrastarlas aguas abajo, afectando de manera drástica el ecosistema.

Como una reflexión final, se debe estar concientes que estas tareas son muy difíciles de llevar acabo y pueden resultar sumamente caras en el mejor de los casos y poco realistas en algunos otros; la mejor técnica de eliminar biofilms y cualquier otro agente que altere el medio ambiente, consiste en no insentivar su proliferación por contaminación.

---

## Apéndice A

### Simbología

---

Símbolo	Significado
$D$	Zona acuática (río, lago, zona costera, etc.)
$\Omega_i$	Subregión contenida en $D$
$r_0$	punto interior de $D$
$t$	tiempo
$T$	un tiempo fijo
$Q(t)$	taza de suministro en función de $t$
$c_i$	concentración promedio crítica
$\tau$	tiempo que persiste la concentración $c_i$
$m(Q)$	funcional de la masa total del limpiador suministrado en $D$
$r = (x, y, z)$	un punto cualquiera $r$ con coordenadas $x, y, z$
$\phi = \phi(r, t)$	concentración puntual del limpiador en $D$
$\vec{U} = U(\vec{r}, t)$	velocidad del campo advectivo en este caso agua
$J_i(\phi)$	funcional que estima la concentración $\phi$ en cada zona $\Omega_i$
$\mu(r, t)$	coeficiente de difusión turbulenta
$\sigma(r, t)$	coeficiente de transformación química del limpiador
$\vec{\phi}_s$	gradiente de sedimentación
$\nu_s$	velocidad constante
$\delta(r - r_0)$	función delta de Dirac centrada en $r_0$

---

<b>Símbolo</b>	<b>Significado</b>
$\zeta(r, t)$	coeficiente de evaporación del limpiador
$S_T$	frontera superficial que delimita la región $D$
$S_B$	frontera de fondo que delimita la región $D$
$S^+$	parte cerrada o de salida de flujo en $D$
$S^-$	parte de ingreso de flujo en $D$
$f(r, t)$	forzamiento
$g_i(r_0, t)$	funciones adjuntas o de peso
$Q^*(t)$	taza de descarga óptima del limpiador químico en función de $t$
$H$	profundidad

Cuadro A.1: Lista de simbología utilizada en este trabajo.  $i = 1, 2, 3, \dots, N$ .

---

## Apéndice B

### Algoritmo

---

A continuación se describe de manera general y resumida la estructura del algoritmo implementado para aproximar la solución de la ecuación de transporte 2.3 sin dar el listado del programa. Es importante mencionar, que de ningún modo se intentó escribir software profesional de carácter general, por esta razón, el algoritmo no está escrito de forma que conduzca al programa más efectivo en términos computacionales que busque cumplir necesariamente con requisitos mínimos de tiempo o almacenamiento.

## Discretización temporal

.....

### Rutina 1

*Comentario:* Con base en un esquema Crank Nicholson, esta rutina, aproxima la concentración  $\phi$  en una malla en el intervalo de tiempo  $t_k \leq t \leq t_{k+1}$  con punto intermedio  $t_{k+1/2}$ .

**ENTRADAS:**T, M

**SALIDA:** $\tau = \frac{T}{M}$

**Paso 1:** Genera una malla

Para  $k = 0, 1 \dots M$ ,

Tome  $t_k = k\tau$

**Paso 2:** Para cada paso de tiempo  $\tau$  calcula la concentración en el siguiente punto

**SALIDA**

$$\phi^{k+1} = T^k \phi^k + \tau S^k f^{k+\frac{1}{2}}$$

.....

**Rutina 2**

*Comentario:* En esta rutina, se implementa el esquema Cranck Nicholson basado en la separacion de operadores  $\Lambda_\alpha^k = A_\alpha(t_{k+\frac{1}{2}})$ , en  $t_k \leq t \leq t_{k+1}$ ,  $\alpha = 1, 2$ , con el propósito de mejorar la aproximación anterior.

**ENTRADAS:** T, M

**SALIDA:**  $\tau = \frac{T}{M}$

**Paso 1:** Genera una malla

Para  $k = 0, 1 \dots M$ ,

Tome  $t_k = k\tau$

**Paso 2:** Para cada paso de tiempo  $\tau$  calcula la concentración en el siguiente punto

**SALIDA**

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

.....

**Rutina 3**

*Comentario:* En esta rutina, se implementa el esquema Cranck Nicholson basado en la separacion de operadores  $\Lambda_\alpha^k = A_\alpha(t_k)$ , en  $t_{k-1} \leq t \leq t_{k+1}$ ,  $\alpha = 1, 2$ , con el propósito de mejorar aún más la aproximación anterior.

**ENTRADAS:** T, M

**SALIDA:**  $\tau = \frac{T}{M}$

**Paso 1:** Genera una malla

Para  $k = 0, 1 \dots M$ ,

Tome  $t_k = k\tau$

**Paso 2:** Para cada paso de tiempo  $\tau$  calcula la concentración en el siguiente punto

**SALIDA**

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

.....

**Rutina 4**

*Comentario:* En esta rutina, se hace un aplicación sucesiva del esquema Cranck Nicholson, tomando tres puntos intermedios en el intervalo  $t_{k-1} \leq t \leq t_{k+1}$ , basado en la separacion de operadores  $\Lambda_\alpha^k = A_\alpha(t_k)$ ,  $\alpha = 1, 2$ .

**ENTRADAS:**T, M

**SALIDA:** $\tau = \frac{T}{M}$

**Paso 1:**Genera una malla

Para  $k = 0, 1 \dots M$ ,

Tome  $t_k = k\tau$

**Paso 2:**Para cada paso de tiempo  $\tau$  calcula la concentración en el siguiente punto

**SALIDA**

$$\phi^{k+1} = T^k \phi^{k-1} + 2\tau S^k f^k$$

.....

## Discretización espacial

.....

### Rutina 5

*Comentario:* En esta rutina, se utiliza una malla de Arakawa tipo c centrada en tres puntos en el intervalo  $i - 1 \leq i \leq i + 1$ , para aproximar  $\phi$  tomando una malla unidimensional en la componente  $x$  consecuencia de la separación de operadores  $A_1$  y  $A_2$ .

**ENTRADAS:**  $\sigma, u, \mu, \Delta x$

**Paso 1:** Genera una malla en el eje  $x$

Para  $i = 1 \dots N$ ,

**Paso 2:** Sustituye la fórmula de diferencias finitas correspondientes a las derivadas parciales evaluadas en cada punto de la malla

**SALIDA**

$$A_1 = \frac{1}{2}\sigma_i\phi_i + \frac{u_{i+\frac{1}{2}}\phi_{i+1} - u_{i-\frac{1}{2}}\phi_{i-1}}{2\Delta x} + \mu \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2}$$

.....

### Rutina 6

*Comentario:* En esta rutina, se utiliza una malla de Arakawa tipo c centrada en tres puntos en el intervalo  $j - 1 \leq j \leq j + 1$ , para aproximar  $\phi$  tomando una malla unidimensional en la componente  $y$  consecuencia de la separación de operadores  $A_1$  y  $A_2$ .

**ENTRADAS:**  $\sigma, v, \mu, \Delta y$

**Paso 1:** Genera una malla en el eje  $y$

Para  $j = 1 \dots N$ ,

**Paso 2:** Sustituye la fórmula de diferencias finitas correspondientes a las derivadas parciales evaluadas en cada punto de la malla

**SALIDA**

$$A_2 = \frac{1}{2}\sigma_j\phi_j + \frac{u_{j+\frac{1}{2}}\phi_{j+1} - u_{j-\frac{1}{2}}\phi_{j-1}}{2\Delta y} + \mu \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta y^2}$$

.....

**Rutina 7**

*Comentario:* Esta rutina ensambla las rutinas 4,5 y 6 y genera una matriz  $A$  de  $N \times N$  que es tridiagonal por bloques.

$$A = \begin{pmatrix} B & I & & \\ I & B & I & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & I & B & \end{pmatrix}$$

Supóngase que se tiene el sistema tridiagonal de  $l+1$  ecuaciones con  $l+1$  incógnitas:

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

donde la matriz del sistema se supone definida positiva, para garantizar que la solución del sistema sea única. La solución se obtiene con el siguiente esquema.

**Paso 1:**Sustitución hacia adelante

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

$$\alpha_k = \frac{c_k}{b_k - a_k\alpha_{k-1}} \quad \text{y} \quad \beta_k = \frac{a_k\beta_{k-1} - f_k}{b_k - a_k\alpha_{k-1}} \tag{B.2}$$

**Paso 2:**Tomar

$$\varphi_l = \frac{\alpha_l\beta_{l-1} + \beta_l}{1 - \alpha_l\alpha_{l-1}} \tag{B.3}$$

**Paso 3:**Sustitución hacia atrás

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

$$\varphi_k = \alpha_k\varphi_{k+1} + \beta_k \tag{B.4}$$

Este algoritmo se aplica a (5.31) para aproximar las soluciones numéricas de los modelos diferenciales (2.3)-(3.11). El código fué programado en MATLAB®.

Para verificar el correcto desempeño de los algoritmos implementados, se comparan las predicciones de los modelos numéricos de dispersión y su adjunto, con el valor esperado de la concentración promedio que se debe obtener con las integrales exactas de las tasas de emisión y la distribución inicial de la sustancia, según la ecuación de balance,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi \, d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^N Q_i(t) - \int_D \sigma \phi \, d\mathbf{r} - \int_{S^+} \phi U_n \, dS \quad (\text{B.5})$$

Sea  $\sigma = 0$  y  $\phi = 0$  en  $S$  para  $0 \leq t \leq T$ , al integrar (B.5),

$$\begin{aligned} J_{D,T}(\phi) &= \frac{1}{|D|T} \int_0^T \int_D \phi(\mathbf{r}, \zeta) \, d\mathbf{r} \, d\zeta \\ &= \frac{1}{|D|T} \sum_{i=1}^N \int_0^T \int_0^\zeta Q_i(t) \, dt \, d\zeta + \frac{1}{|D|} \int_D \phi^0(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Si  $\phi^0 = 0$  y las tasas de emisión son constantes, la ecuación (B.6) es simplemente,

$$J_{D,T}(\phi) = \frac{T}{2|D|} \sum_{i=1}^N Q_i, \quad (\text{B.7})$$

y en el caso  $Q_i = a_i t$ ,

$$J_{D,T}(\phi) = \frac{T^2}{6|D|} \sum_{i=1}^N a_i \quad (\text{B.8})$$

Veamos tres ejemplos donde fueron aplicadas las dos últimas ecuaciones en la siguiente forma: los lados izquierdos se evaluaron numéricamente y los lados derechos ( $E$ ) se calcularon en forma exacta. Los parámetros utilizados y el tiempo de cómputo ( $T_c$ ) en que se llevan acabo los cálculos, se dan en los cuadros B.1 y B.2.

Ej.	$u$	$v$	$\mu$	$Q_1$	$Q_2$	$\mathbf{r}_1$	$\mathbf{r}_2$	$X$	$Y$
1	-0.75	0.75	0.04	3.8	0.0	(1.5, 0.5)	(0.0, 0.0)	2	2
2	-0.5	0.5	0.04	3.8	1.5	(1.5, 0.5)	(0.8, 0.8)	2	2
3	1 . 5	0.84	0.8	$10^4 t$	$5.10^3 t$	(1.5, 1.6)	(1.0, 1.6)	4	4

Cuadro B.1: Parámetros de prueba.

Ej.	$N_x$	$M_y$	$\Delta t$	$N_t$	$T$	$T_c(Seg.)$	$ D $	$\mathbf{J}_{D,T}$	$E$
1	50	50	0.02	50	1.0	101	4.0	0.4749	0.4750
2	50	50	0.02	50	1.0	102	4.0	0.6624	0.6625
3	30	30	0.004	100	0.4	79	16.0	24.9998	25.0000

Cuadro B.2: Parámetros de discretización, con el tiempo de cómputo ( $T_c$ ).

Los resultados de las últimas dos columnas en el cuadro B.2 corroboran que los modelos discretos, y los programas correspondientes, son consistentes con la ecuación de balance de masa (hasta segundo orden).

## Bibliografía

---

- [1] Arfken, G. (1976). *Mathematical Methods for Physics. First Edition, Addison-Wesley*, 557.
- [2] Cheney, E.W. (1966). *Introduction to approximation theory. Chelsea Publishing Company, New York*.
- [3] Crank, J. and P. Nicolson. (1947). A Practical Method for Numerical Evaluation of Solutions of Partial Differential Equations of the Heat Conduction Type. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, **43**, 50-67.
- [4] Douglas, J., R.B. Kellog and R. S. Varga. (1963). Alternating directions methods for n space variables, *Math. Compu.*, 17 , 83.
- [5] Elsgoltz, L. (1983). *Ecuaciones Diferenciales y cálculo variacional. Tercera edición. Editorial Mir, Moscú*, 288.
- [6] Hadamard, J. (1923). *Lectures on Cauchy's problem in linear partial differential equations. Dover Publications, Inc.*
- [7] Kreyszig, E. ( 2006). *Advanced engineering mathematics. John Wiley and Sons, NJ.*
- [8] Luenberger, D. (1984). *Linear and non-linear programming, Addison-Wesley.*

- [9] Marchuk, G. I. (1986). Mathematical models in environmental problems. *Elsevier, New York* .
- [10] Marchuk, G. I. (1975). Methods of numerical mathematics, *Springer-Verlag, NY*.
- [11] Mesinger, F and A. Arakawa. (1982). Numerical methods used in atmospheric models, *GARP publications, series No 17*.
- [12] Parra-Guevara, D, Y. N. Skiba and A. Reyes. (2008). Un modelo variacional para la remediación de sistemas acuáticos contaminados con biofilms. *Libro de Resúmenes del Segundo Congreso Latinoamericano de Estudiantes de Matemáticas (EXPRIME2008)*, 95-99.
- [13] Parra-Guevara, D. and Yu. N. Skiba, A variational model for the remediation of aquatic systems polluted by biofilms. *International Journal of Applied Mathematics, Academic Publications*, **20**,(7), 1005-1026, 2007.
- [14] Parra-Guevara, D. and Y.N. Skiba (2006). On optimal solution of an inverse air pollution problem: Theory and numerical approach. *Mathematical and Computer Modelling, Elsevier*, **43**, **No.7-8**, 766-778.
- [15] Parra-Guevara, D. and Y.N. Skiba (2003). Elements of the mathematical modelling in the control of pollutants emissions. *Ecological Modelling, Elsevier*, **167**, **No.3**, 263-275.
- [16] Parra-Guevara, D. and Y. N. Skiba. (2000). Industrial pollution transport. Parte II: Control of industrial emissions, *Env. Modeling and Assessment* , Baltzer, 5 (3).177-184.
- [17] Pudykiewicz J. (1998). Application of adjoint tracer transport equations for evaluating source parameters, *Atmospheric Environment*, 32 (17), 3039-3050.

- [18] Rektorys, K. (1980). Variational methods in mathematics, science and engineering. *D. Reidel Publishing Company, Dordrecht-Holland*.
- [19] Rossman, L. A., R. M. Clark and W. M. Grayman. (1994). Modeling chlorine residuals in drinking-water distribution systems. *Journal of Environmental Engineering*, 120, 4,803-820.
- [20] Skiba, Y.N., D. Parra and V.D. Belitskaya (2005). Air quality assessment and control of emission rates. *Env. Monitoring and Assessment, Springer*, **111**, 89-112.
- [21] Skiba Y.N. (1996). Dual oil concentration estimates in ecologically sensitive zones, *Environmental Monitoring and Assessment*, **43**. 139-151.
- [22] Skiba, Y.N. (1993). Balanced and absolutely stable implicit schemes for the main and adjoint pollutant transport equations in limited area. *Rev. Intern. Contamin. Ambient.*, **9**, No.2, 39-51.
- [23] Smith, D.R. (1998). Variational methods in optimization. *Dover Publications, Inc., NY*.
- [24] Stewart, P. S., G. A. Mcfeters and C. Huang (2000). Biofilm control by antimicrobial agents. In *Biofilms II: Process analysis and applications*. Wiley-Liss, USA.
- [25] Stewart, P. S. and J. B. Raquepas (1995). Implications of reaction-diffusion theory for the disinfection of microbial biofilms by reactive antimicrobial agents. *Chemical Engineering Science, Pergamon*, **50**, No.19, 3099-3104.
- [26] Strang, G. (1980). Linear algebra, *Academic Press, New York*.

- [27] <http://www.e-mexico.gob.mx/wb2/eMex/eMex> \_El \_agua \_en \_el \_planeta \_tierra.
- [28] [http://mx.encarta.msn.com/encyclopedia\\_761572857/Contamina- ción\\_del\\_agua.html](http://mx.encarta.msn.com/encyclopedia_761572857/Contamina- ción_del_agua.html).
- [29] [http://www.drscope.com/pac/infecto-1/c1/in1c1\\_p37.htm](http://www.drscope.com/pac/infecto-1/c1/in1c1_p37.htm).