



**Universidad Nacional Autónoma de México**

**Centro de Ciencias de la Atmósfera**

“Desarrollo de una estrategia para estimar los parámetros de descarga con fines de biorremediación en sistemas acuáticos contaminados con petróleo”

TESIS

**Que para obtener el grado de:**

**Maestro en Ciencias  
(Modelación Matemática de Sistemas Terrestres)**

**Presenta:**

Fernando Nicolás Arellano Guerrero

ASESOR DE TESIS

Dr. David Parra Guevara

México D. F. - 31 de mayo de 2012



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.

# Resumen de Tesis

---

En este trabajo se considera un problema variacional con el propósito de determinar el sitio óptimo de descarga y la razón de descarga óptima de un nutriente que será liberado dentro de un sistema acuático contaminado con petróleo. El objetivo es minimizar el total de la masa del nutriente descargado dentro del sistema, con la restricción de alcanzar ciertos valores críticos de la concentración promedio del nutriente, que sean suficientes para eliminar los residuos de petróleo en determinadas áreas afectadas a través de biorremediación. Por lo tanto, los valores críticos de éstas concentraciones promedio son usados como restricciones del problema variacional. Además, se considera un problema de valor inicial 3D para la ecuación de advección-difusión, junto con su problema adjunto, para modelar, estimar y controlar la dispersión del nutriente en una región limitada. Siendo las soluciones del modelo de advección-difusión y su adjunto la base para realizar el presente estudio. También, se muestra que el problema de advección-difusión es un problema bien planteado y que sus soluciones satisfacen la ecuación de balance de masa. En cada zona contaminada, la concentración promedio se calcula por medio de una fórmula integral en la cual la solución del modelo adjunto es el núcleo. La expresión analítica para determinar la razón óptima de descarga del nutriente está dada como una combinación lineal de las soluciones del problema adjunto y para la posición óptima, es posible obtener una función no-lineal cuyo valor mínimo corresponde al sitio de descarga óptimo. La aplicación de este nuevo método se muestra con varios ejemplos numéricos, donde se aplica la metodología anterior con el fin de biorremediar tres zonas contaminadas en un canal.

# Dedicatoria

---

Dedico esta tesis a mi madre, por haberme brindado la oportunidad de realizarme en esta carrera y por su gran apoyo y comprensión en todos los momentos difíciles.

# Agradecimientos

---

Agradezco el apoyo económico otorgado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología CONACYT.

Al Dr. David Parra Guevara por su asesoría y dirección en este trabajo.

Al Posgrado en Ciencias de la Tierra por su apoyo académico

Al comité tutorial por la revisión de este trabajo.

A mis compañeros del Centro de Ciencias de la Atmósfera por su apoyo y comentarios.

A toda mi familia, por su apoyo durante mi crecimiento personal y profesional.

Un agradecimiento especial a mi esposa Bárbara Olvera Flores por el apoyo que me brindo en todos los aspectos y que fue indispensable para la realización de este trabajo.

# Índice general

---

<b>Resumen de Tesis</b>	<b>I</b>
<b>Dedicatoria</b>	<b>II</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>III</b>
<b>Lista de símbolos</b>	<b>VII</b>
<b>Índice de figuras</b>	<b>VIII</b>
<b>Introducción</b>	<b>x</b>
Justificación . . . . .	XI
Objetivos . . . . .	XI
<b>1. Biorremediación de sistemas acuáticos</b>	<b>1</b>
1.1. Contaminación de cuerpos de agua por petróleo . . . . .	1
1.2. Estrategias de recuperación de sitios contaminados . . . . .	2
1.2.1. Métodos naturales . . . . .	3
1.2.2. Métodos físicos . . . . .	3
1.2.3. Métodos químicos . . . . .	4
1.3. Biorremediación . . . . .	5
1.3.1. Factores que afectan la biorremediación . . . . .	6

---

1.3.2.	Ventajas de la Biorremediación . . . . .	7
1.3.3.	Desventajas de la biorremediación . . . . .	8
1.4.	Modelos de dispersión . . . . .	8
1.5.	Planteamiento del problema de biorremediación de sistemas contaminados por petróleo . . . . .	10
1.6.	Modelo adjunto . . . . .	11
1.7.	Operador adjunto . . . . .	12
1.7.1.	Existencia del operador adjunto . . . . .	13
1.8.	Unicidad del operador adjunto . . . . .	13
<b>2.</b>	<b>Biorremediación en una columna de agua (1-D)</b>	<b>16</b>
2.1.	Planteamiento del problema . . . . .	16
2.2.	Método directo . . . . .	17
2.2.1.	Razón de descarga constante $Q(t)=Q$ . . . . .	20
2.2.2.	Razón de descarga variable $Q(t)$ . . . . .	22
2.3.	Método adjunto . . . . .	25
2.3.1.	Solución de la ecuación adjunta . . . . .	28
2.3.2.	Razón de descarga constante $Q(t) = Q$ . . . . .	29
2.3.3.	Razón de descarga variable $Q(t)$ . . . . .	30
2.4.	Solución numérica . . . . .	31
2.5.	Ejemplo 1 . . . . .	34
<b>3.</b>	<b>Modelo de dispersión y su adjunto (3-D)</b>	<b>40</b>
3.1.	Modelo de dispersión . . . . .	40
3.1.1.	Ecuación de balance de masa . . . . .	42
3.1.2.	Existencia, unicidad y estabilidad de la solución del modelo de dispersión	42
3.2.	Modelo adjunto . . . . .	44
3.2.1.	Peculiaridades de las estimaciones duales y la sensibilidad de las fórmulas	48

---

---

<b>4. Resultados Analíticos</b>	<b>50</b>
4.1. Propiedades del espacio de factibilidad y el funcional de masa . . . . .	50
4.2. Razón de descarga óptima . . . . .	53
4.3. Sitio de descarga óptimo . . . . .	56
<b>5. Esquemas numéricos y ejemplos</b>	<b>59</b>
5.1. Separación de operadores componente por componente . . . . .	59
5.2. Discretización de operadores . . . . .	61
5.3. Reducción del problema de dispersión en 3D a un problema de 2D . . . . .	65
5.4. Solución alternativa al problema de optimización . . . . .	68
5.5. Ejemplos . . . . .	69
5.5.1. Ejemplo 2. Cálculo de funciones adjuntas y descargas óptimas . . . . .	69
5.5.2. Ejemplo 3. Determinación del sitio óptimo . . . . .	73
<b>Conclusiones</b>	<b>76</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>79</b>

---



# Lista de símbolos

---

$D$	Dominio o región de estudio.
$\Omega_i$	Zonas objetivo de biorremediación.
$r_0$	Punto de descarga.
$Q(t)$	Razón de descarga del nutriente.
$\phi(r, t)$	Concentración del nutriente.
$c_i$	Concentración crítica del nutriente.
$\tau$	Lapso de tiempo para estimular la biodegradación.
$T$	Tiempo total de descarga.
$m(Q)$	Funcional de masa.
$J_i$	Funcional de concentración promedio.
$U$	Campo de velocidad.
$\mu(r, t)$	Coefficiente de difusión turbulenta.
$\sigma(r, t)$	Coefficiente de transformación química.
$\zeta$	Coefficiente de evaporación.
$S^+$	Frontera donde existe flujo de salida.
$S^-$	Frontera donde existe flujo de entrada.
$S_T$	Frontera superficial.
$S_B$	Frontera de fondo.
$\partial D$	Frontera del dominio $D$ .
$\hat{n}$	Vector unitario normal a la frontera $\partial D$ .
$\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$	Vectores unitarios cartesianos.
$L_2(D)$	Espacio de funciones cuadrado-integrables.
$(\cdot)$	Producto interno.
$\ \cdot\ $	Norma euclideana.
$()^*$	Variable adjunta.
$g(r, t)$	Función adjunta de $\phi(r, t)$ .
$\delta(r - r_0)$	Delta de Dirac.
$dS$	Diferencial de superficie.

# Índice de figuras

---

1.1. Dispersión de una sustancia por los procesos de difusión, advección, transformación química, sedimentación y evaporación. . . . .	9
1.2. Suministro de nutrientes en la posición $r_0$ a una razón de descarga $Q(t)$ para la biorremediación de tres zonas contaminadas $\Omega_i$ , $i = 1, 2, 3$ . . . . .	11
2.1. Biorremediación en una columna de agua con una zona contaminada ( $\Omega_1 = [\alpha_1, \beta_1]$ ), empleando una fuente de nutrientes ubicada en $z = z_0$ . . . . .	17
2.2. Cálculo de eigenvalores $\lambda_n$ , cuando $\xi/\mu = 1$ . . . . .	19
2.3. Razón de descarga variable $Q(t)$ . . . . .	23
2.4. Base unitaria $\psi$ . . . . .	24
2.5. Tasas de descarga con las funciones adjuntas. . . . .	32
2.6. Biorremediación de una columna de agua con una o dos zonas contaminadas ( $\Omega_i = [\alpha_i, \beta_i]$ , $i = 1, 2$ ), considerando una fuente de nutrientes ubicada en $z = z_0$	34
2.7. a) Cálculo de la concentración de nutriente $\phi(z, t)$ , b) Concentración promedio $c_i$ en las zonas $\Omega_1 = [0.3, 0.4]$ y $\Omega_2 = [0.8, 0.9]$ y c) perfil de concentración de nutriente para $t=8$ , considerando $\zeta=0.3$ y $\mu=0.1$ . . . . .	34
2.8. Sitio óptimo de descarga cuando se tiene una zona contaminada, considerando $\zeta=0.3$ y $\mu=0.1$ . . . . .	35
2.9. Sitio óptimo de descarga para dos zonas contaminadas. . . . .	36
2.10. Variación de soluciones adjuntas $g_1(z, t)$ y $g_2(z, t)$ . . . . .	37
2.11. Funciones adjuntas en sitios óptimos $g_1(z_0^*, t)$ y $g_2(z_0^*, t)$ , para los casos 1 y 2 .	37
2.12. a) Funcional de masa $m_{Q(t)}(z_0)$ , b) Concentración promedio en la zonas $\Omega_i$ $i = 1, 2$ y c) Razón de descarga óptima, para el caso 5 de la tabla 2.1. . . . .	38

2.13. a) Funcional de masa $m_{Q(t)}(z_0)$ , b) Concentración promedio en la zonas $\Omega_i$ $i = 1, 2$ y c) Razón de descarga óptima, para el caso 6 de la tabla 2.1. . . . .	39
3.1. Dominio de estudio $D$ . . . . .	41
5.1. Dominio $D = [0, X] \times [0, Y] \times [0, Z]$ de descomposición del operador A del modelo de dispersión (3.1). . . . .	60
5.2. Posición de los nodos de la malla para las variables $\phi, u, v, w, \mu$ . . . . .	62
5.3. Posición de los nodos de la malla adyacentes a las fronteras en el eje $x$ man- teniendo $j$ y $k$ constantes. . . . .	63
5.4. Discretización del tiempo en el intervalo $(t_n - \Delta t, t_n + \Delta t)$ . . . . .	63
5.5. Biorremediación de un canal de fondo plano con tres zonas contaminadas. . .	70
5.6. Funciones adjuntas $g_i(r_0, t)$ , $i = 1, 2, 3$ . . . . .	70
5.7. Razones de descarga óptimas $q_k = Q_k(t)/H$ , $k = 1, 2, \dots, 7$ . . . . .	71
5.8. Evolución de la concentración de nutriente en las zonas $\Omega_i$ , $i = 1, 2, 3$ . . . . .	72
5.9. Isolíneas de igual concentración de nutriente en la región $D$ para $T = 4 h$ , considerando la razón de descarga $Q_7(t)$ . . . . .	72
5.10. Razones de descarga . . . . .	73
5.11. Biorremediación de un canal bidimensional con tres zonas contaminadas. . .	74
5.12. Tasas de descarga con las funciones adjuntas. . . . .	74
5.13. Función indicativa. . . . .	75

# Introducción

---

La biorremediación o saneamiento biológico es una tecnología basada en procesos naturales que utiliza la capacidad de algunos microorganismos, tales como bacterias y hongos, para transformar compuestos químicos con la finalidad de disminuir o eliminar su condición de peligrosidad (Cook y Westlake, 1972). La descarga de petróleo y sus productos derivados a las corrientes naturales de aguas superficiales y subterráneas ha planteado un problema que, en la mayoría de los casos, ha adquirido bastante gravedad. En el caso de aguas superficiales la adición de nutrientes se realiza sin menor complicación en el área a tratar con el objeto de aumentar la población nativa para acelerar el proceso de biodegradación.

Actualmente se ha demostrado que la biorremediación es una técnica eficaz para la recuperación de sitios contaminados tanto en agua como en suelo y que además es de muy bajo costo. Una forma de abordar el problema de biorremediación, es mediante el uso de un modelo matemático que involucre la mayor cantidad de variables del problema de estudio para que la solución este más cercana de la realidad. En general los modelos se clasifican en problemas directos y problemas inversos, en un problema directo se requiere hallar la solución a un conjunto de ecuaciones con algunos parámetros conocidos, como la geometría, condiciones iniciales, condiciones de frontera y los valores de los parámetros. En un problema inverso se tiene información sobre la solución de las ecuaciones y lo que se busca es la condición sobre los parámetros del modelo para que la solución al problema directo cumpla con esas condiciones.

Los modelos de dispersión tienen un papel importante en diversos problemas de interés ecológico como lo son: estimación ambiental por derrames de petróleo, ubicación óptima de nuevas plantas industriales y el control ó monitoreo de la concentración de contaminantes en la atmósfera. Por esta razón podemos hacer uso de estos modelos para determinar la concentración de un nutriente en un sistema acuático contaminado, el cual represeta nuestro problema directo y el problema inverso del modelo de dispersión nos ayudará a determinar los parámetros de descarga de un nutriente, es decir, la razón de descarga de un nutriente y la posición de la fuente de nutriente, con el objetivo de minimizar la cantidad de masa total del nutriente, logrando de esta forma una estrategia de recuperación de un sistema acuático contaminado de bajo costo por medio de la biorremediación.

## Justificación

Las actividades de la industria petrolera tienen un gran impacto sobre los mares, océanos, ríos, playas y costas, por fugas y derrames de hidrocarburos; así como, por el depósito de residuos generados durante los procesos de perforación y explotación. El impacto por un derrame durante las primeras horas puede mitigarse a través de procesos de contención; sin embargo, la capacidad de los métodos tradicionales que además de ser costosos, se ven limitados por las condiciones presentes en el lugar de contaminación, motivo por el cual hacen imposible lograr la recolección total de hidrocarburos. Además, al paso del tiempo la sedimentación de hidrocarburos sobre los fondos marinos generan un severo impacto sobre los ecosistemas cercanos a las zonas contaminadas; por lo tanto, es de suma importancia que se mejoren o desarrollen estrategias de saneamiento efectivas y de bajo costo que permitan la máxima recuperación de una zona contaminada.

## Objetivos

### Objetivo general

- El objetivo de este trabajo es diseñar una estrategia de biorremediación de bajo costo que nos permita estimar los parámetros de descarga de un nutriente (razón de descarga y posición de la fuente) empleando el modelo de dispersión y su adjunto, con el fin de optimizar la masa total del nutriente suministrado con la restricción de que se alcancen concentraciones críticas de nutrientes en las zonas de interés y se logre la máxima degradación de contaminantes.

### Objetivos particulares

- Plantear la estrategia de biorremediación mediante una formulación variacional.
  - Mostrar ejemplos de biorremediación en una dimensión resolviendo el problema directo y su inverso con el método de series de Fourier.
  - Definir un modelo de dispersión y su modelo adjunto sobre un dominio tridimensional con condiciones de frontera mixtas.
  - A partir del modelo de dispersión y su adjunto, obtener las expresiones que permitan calcular los parámetros de descarga del nutriente (razón de descarga y posición de la fuente) con la condición de minimización de la masa total del nutriente.
  - Aplicar la estrategia desarrollada en el presente trabajo sobre un canal de fondo plano en tres dimensiones.
-

## Descripción general de la tesis

A continuación damos un panorama sobre el presente trabajo.

En el capítulo 1 se da una descripción general del problema de biorremediación de sistemas contaminados con petróleo y algunas definiciones que permitirán un mejor entendimiento del problema. Además se plantea la estrategia de biorremediación como un problema de optimización mediante una formulación variacional y la teoría básica de los modelos de dispersión y el modelo adjunto. En el capítulo 2 se presentan un par de ejemplos unidimensionales de biorremediación, los cuales servirán como introducción al problema general de esta tesis.

En el capítulo 3 se plantean el modelo de dispersión y su adjunto para un dominio tridimensional, los cuales nos permitirán obtener las relaciones para los parámetros de descarga del nutriente en un sistema acuático contaminado, y en el capítulo 4 se da un conjunto de resultados analíticos sobre los cuales se sustenta el presente trabajo.

En el capítulo 5 se describen los esquemas numéricos utilizados para resolver el modelo de dispersión y su adjunto y varios ejemplos donde se aplica la estrategia desarrollada en los capítulos previos.

Finalmente, se dan las conclusiones del trabajo.

Todos los resultados numéricos y gráficos se han obtenido utilizando un programa realizado con el lenguaje de programación de MATLAB.

---

# Biorremediación de sistemas acuáticos

---

## 1.1. Contaminación de cuerpos de agua por petróleo

El agua constituye un elemento natural indispensable para el desarrollo de la vida y de las actividades humanas, por lo cual, resulta difícil imaginar cualquier tipo de actividad en la que no se utilice de una u otra forma. Sin embargo, este elemento vital está expuesto a la contaminación causada por las actividades humanas, mediante la introducción directa o indirecta en los ríos, lagos, costas, mares y océanos de sustancias líquidas, sólidas o gaseosas, dañinas para los organismos vivos del medio acuático y que representan un peligro para la salud de las personas y animales. Por lo tanto, es de vital importancia no sólo tratar de evitar la contaminación de este recurso, sino también diseñar estrategias que puedan ayudar a restaurar los sistemas acuáticos que se vean afectados por la contaminación.

Actualmente el petróleo y sus derivados son imprescindibles para la fabricación de múltiples productos de la industria química, farmacéutica, alimenticia, etc., además es una fuente importante de energía. Los derrames de petróleo son eventos que representan una gran amenaza para el ambiente. A menudo se cree que los derrames de petróleo son la principal fuente de contaminación como lo fue el incidente del buque Exxon Valdez; sin embargo, la mayor parte de la contaminación se debe a la dispersión del petróleo sobre la superficie, por las actividades de extracción, transporte, refinamiento y el tráfico ilegal del petróleo (Suni et al., 2007). Se estima que entre 1.7 y 8.8 millones de toneladas métricas de petróleo son vertidas cada año (NAS,1985), de las cuales más del 90 % es directamente liberado por las actividades humanas.

La magnitud de los efectos del petróleo sobre los ecosistemas marinos depende del tipo de petróleo (crudo o refinado), cantidad derramada, distancia del sitio contaminado con la costa, época del año, condiciones atmosféricas, temperatura media del agua y corrientes oceánicas.

Al ocurrir un derrame de petróleo, se disminuye la entrada de luz al mar a causa de las manchas de petróleo, lo cual reduce el área donde es posible la fotosíntesis y, por lo tanto, el desarrollo de plantas verdes. La falta o disminución de plantas fotosintéticas reduce

el aporte de oxígeno y alimento a los ecosistemas como lo es el fitoplancton, el cual es a su vez alimento del zooplancton. Por lo tanto, al faltar fitoplanctón, el zooplancton muere y con él se interrumpe el crecimiento de un importante número de especies y al mismo tiempo se deja sin alimento a un gran número de animales marinos.

Además, el petróleo sobre la superficie se queda impregnado sobre las aves y al intentar limpiarse el plumaje, ingieren grandes cantidades de hidrocarburos por lo que se envenenan. Los mamíferos marinos como focas y nutrias de mar mueren por asfixia por la obstrucción de sus vías respiratorias por los hidrocarburos y pueden morir también por ingerir grandes cantidades de hidrocarburos al alimentarse de animales contaminados.

También algunos componentes químicos del petróleo pueden interferir con algunas sustancias químicas, como las feromonas que los animales marinos secretan para llevar a cabo procesos vitales y de comunicación. Estos compuestos químicos les sirven para realizar diferentes procesos, como escapar de los animales de presa, atracción sexual, selección de su hábitat y la alimentación. El petróleo más pesado se deposita sobre los fondos marinos matando o provocando efectos irreversibles sobre muchos animales y plantas vitales para los ecosistemas.

La mayoría de los ecosistemas marinos expuestos a grandes cantidades de petróleo crudo requieren de unos 3 años para su recuperación. Sin embargo, los ecosistemas marinos contaminados por petróleo refinado, en especial en los estuarios, requieren de 10 años o más (Jewett S.C., et al., 2002). La contaminación de las playas por petróleo causa serios problemas económicos a los habitantes de las costas, ya que pierden ingresos por la actividad pesquera y la turística. Las playas contaminadas por petróleo, cuando tienen corrientes y olas intensas, requieren de al menos un año para su recuperación, pero las playas que no tienen estas características tardan varios años en recuperarse. Los estuarios y marismas sufren el mayor daño y no pueden limpiarse eficazmente.

## 1.2. Estrategias de recuperación de sitios contaminados

Los métodos y procedimientos para la contención y recuperación de petróleo en un derrame dependen de una gran variedad de factores, tales como el tipo de petróleo, las corrientes marinas, el oleaje sobre la mancha de petróleo, la hidrografía y las condiciones meteorológicas presentes durante las operaciones de limpieza. Diversos métodos e instrumentos se han desarrollado con el propósito de controlar y remediar las zonas contaminadas por petróleo. Existen métodos naturales, físicos y químicos que ayudan a la remediación de sitios contaminados, los cuales describiremos brevemente a continuación.

---



### 1.2.1. Métodos naturales

La reducción natural o recuperación natural, es una opción en la cual no existe intervención humana, sino que por medios naturales el petróleo es removido y degradado. En algunos casos de derrames de petróleo, es muy probable que sea altamente costosa la limpieza de un sitio, siendo la mejor opción dejar que su recuperación sea natural. Ejemplos de estos casos son los derrames en lugares inaccesibles o en lugares en los cuales las actividades de limpieza causen más daños que beneficios. Los procesos naturales que favorecen a la reducción de petróleo son:

- **Evaporación.** La evaporación es el proceso de limpieza más importante durante las primeras etapas de un derrame de petróleo y da como resultado la eliminación de los componentes más ligeros. Dependiendo de la composición del petróleo derramado, más del 50 % de los componentes más tóxicos y ligeros pueden evaporarse en las primeras 12 horas del derrame de petróleo (Alfonso V. Botello, Susana Villanueva F., Leonardo García Hernández, 2007)
- **Fotooxidación.** Este proceso natural ocurre cuando el oxígeno expuesto a la luz del sol, reacciona con los componentes del petróleo. La fotooxidación da como resultado, el rompimiento de los compuestos complejos del petróleo a compuestos más simples que tienden a ser más ligeros en peso y más solubles en agua, permitiendo que sean removidos mediante otros procesos (Alfonso V. Botello, Susana Villanueva F., Leonardo García Hernández, 2007)
- **Biodegradación.** En este proceso actúan varios tipos de microorganismos dispersos en la naturaleza capaces de degradar hidrocarburos. La biodegradación es un mecanismo particularmente importante para la eliminación de los componentes del petróleo no volátiles. Este es un proceso lento y puede requerir meses o hasta años para que los microorganismos degraden una fracción significativa del petróleo estratificado dentro de los sedimentos marinos (Alfonso V. Botello, Susana Villanueva F., Leonardo García Hernández, 2007)

### 1.2.2. Métodos físicos

Para los métodos físicos es necesario que exista interacción humana con el medio afectado por medio de sistemas mecánicos como son: barreras de contención, skimmers, lavado directo, recolección mecánica, incineración in-situ, los cuales describimos a continuación.

- **Barreras y Skimmers.** Se emplean barreras de contención para retener el crudo en determinados lugares para acumularlo y recolectarlo con ayuda dispositivos atractores de petróleo (skimmers), los cuales tienen la capacidad de repeler el agua al momento de su recolección, *siendo este método altamente eficiente para la recuperación de petróleo.*

- **Recolección mecánica.** Es la recolección de sedimentos de petróleo empleando instrumentos mecánicos como excavadoras, dragas, cintas transportadoras, etc. Se puede utilizar en tierra siempre que los lugares sean muy accesibles y soporten la maquinaria pesada; también se utilizan para limpiar fondos con exceso de petróleo.
- **Lavado directo.** Se hace fluir agua a presión para diluir el petróleo sólo en áreas con altas concentraciones de petróleo, manteniendo precauciones para no dañar las zonas.
- **Incineración in-situ.** El crudo flotante es retenido empleando barreras resistentes al fuego para incinerarlo. Mientras el tipo de petróleo sea más denso es extremadamente difícil de quemar, causando una contaminación significativa del aire poniendo en riesgo la salud humana y la de los animales, además de la destrucción de la vegetación en caso de estar cerca de la costa.

El uso de barreras y skimmers es un método eficaz de limpieza de derrames de petróleo porque se obtiene el mínimo daño al medio ambiente si el proceso se lleva a cabo correctamente (Zhu et al., 2001). El lavado directo es un método eficaz sobre regiones costeras, sin embargo, al aplicar este método, se requiere de más tiempo de trabajo, además el petróleo removido es llevado hacia otras zonas donde será recolectado por otros métodos.

### 1.2.3. Métodos químicos

Los métodos químicos emplean sustancias que modifican la composición del petróleo con el fin de tener una mejor recolección de hidrocarburos empleando los métodos físicos o naturales mencionados anteriormente. Sin embargo, los métodos químicos no se utilizan ampliamente dado que a largo plazo existen efectos de toxicidad en las aguas por las grandes cantidades de sustancias químicas. Las diversas sustancias químicas que se emplean son: dispersantes, demulsificadores, solidificadores, entre otros, los cuales describimos a continuación.

- **Dispersantes.** Los dispersantes hacen que el petróleo se diluya en el de agua y han sido utilizados ampliamente como medida de respuesta ante un derrame de petróleo.
  - **Demulsificadores.** Los demulsificadores se emplean para separar el petróleo mezclado con las aguas con el fin de aumentar su dispersión.
  - **Químicos para capas de petróleo.** Agentes formadores de estratos pueden utilizarse para evitar la adherencia del petróleo sobre las costas y para incrementar la recolección de petróleo adherido en las superficies empleando la técnica de lavado con agua a presión.
  - **Solidificadores.** Con esta técnica se pretende reducir la solubilidad y movilidad de los elementos contaminantes mediante modificación de su estado químico convirtiéndolo en un sólido de manipulación sencilla y segura, evitando riesgos de volatilización.
-

Los métodos químicos para la limpieza del petróleo no se han utilizado mucho en los Estados Unidos; sin embargo, sobre costas muy asperas como las que se tienen en el Reino Unido, la utilización de dispersantes es esencial para su recuperación (Lessard y Demarco, 2000). Los Estados Unidos han sido estrictos para utilizar los métodos químicos, debido a la posibilidad de que algunos compuestos sean tóxicos para el ambiente (Zhu et al., 2001).

### 1.3. Biorremediación

El petróleo se compone de muchos compuestos tóxicos que ponen en peligro el hábitat natural inmerso en el sitio del derrame; sin embargo, actualmente se sabe que muchos microorganismos naturales son capaces de sobrevivir ante un derrame y además tienen la capacidad de degradar los compuestos tóxicos del petróleo. Al proceso que emplea microorganismos con el fin de limpieza se le conoce como biorremediación y se ha demostrado que es un método eficaz para la recuperación de las zonas marinas afectadas por derrames de petróleo (Coulon et al., 2006).

Tal como mencionamos anteriormente, existen diferentes métodos para la limpieza ante un derrame, los cuales en combinación con la biorremediación pueden dar mejores resultados. Se ha encontrado que la combinación de los métodos tradicionales con biorremediación da como resultado una mayor limpieza con una disminución significativa de los costos y de las horas de trabajo. La biorremediación puede aplicarse de dos formas distintas, la primera mediante la adición de microorganismos degradantes de hidrocarburos directamente sobre el sitio afectado, a esto se le conoce como bioaumentación; la segunda forma consiste en suministrar nutrientes en la zona afectada para estimular el proceso de biodegradación, a esto se le conoce como bioestimulación.

La bioestimulación se practica para la limpieza de derrames de petróleo del mar cuando hay una población de microbios degradantes del petróleo. Cuando hay un derrame de hidrocarburos, el resultado es un aumento grande en carbono, lo que también estimula el crecimiento de los microorganismos degradantes del petróleo. Sin embargo, la tasa de crecimiento de estos microorganismos está limitada por la cantidad de nitrógeno y fósforo disponible.

Mediante la adición de estos nutrientes suplementarios en concentraciones adecuadas, los microbios degradantes de hidrocarburos son capaces de lograr su máxima tasa de crecimiento y por lo tanto, la tasa máxima de degradación de contaminantes. Se ha encontrado que cuando se utiliza nitrógeno como nutriente, una máxima tasa de crecimiento de los microorganismos se realiza a una concentración de 2.0 mg / L (Boufadel et al., 2006).

Un factor importante para practicar la bioestimulación con éxito, es lograr una concentración de nutrientes necesarios para el crecimiento máximo de los microorganismos y , mantener esta concentración por un periodo , siempre y cuando sea posible. Dependiendo del lugar donde se aplique este método, esta situación puede convertirse en una situación difícil debido a las influencias físicas, tales como las diferentes concentraciones de nutrientes que

se deben lograr en distintos lugares y los movimientos de las olas y las mareas (Boufadel et al., 2006). Cuando los nutrientes aplicados se disuelven en el agua, los nutrientes se mueven junto con el agua y este movimiento puede variar de acuerdo a las condiciones del sitio. Los estudios de trazadores se utilizan con frecuencia para examinar de que forma los nutrientes son influenciados en diferentes situaciones de acuerdo a la dinámica de los mares y océanos.

Para investigar el papel de las mareas Boufadel et al., (2006), mediante varios experimentos mostró que los nutrientes tienden a undirse durante mareas crecientes y adentrarse en el mar cuando se tienen mareas decrecientes. Esta información es muy útil en la determinación del momento adecuado para agregar nutrientes a las zonas contaminadas con el fin de que el tiempo de permanencia del nutriente sobre la zonas afectadas sea máxima. De los resultados de tales experimentos, se llegó a la conclusión de que los nutrientes deben aplicarse durante la marea baja sobre la línea de costa, lo cual permite un mayor tiempo de contacto entre los nutrientes con los microorganismos degradantes de petróleo.

Las olas también tienen un efecto importante en la distribución de los nutrientes disueltos, debido a que modifica el tiempo de residencia de los nutrientes sobre las áreas afectadas por petróleo. Investigaciones realizadas por Boufadel et al., (2007), concluyeron que las olas aumentan la dispersión del nutriente, disminuyendo su concentración y que el tiempo de permanencia del nutriente cuando se tiene la presencia de olas con mareas, es aproximadamente el 75 % del tiempo de permanencia cuando se tiene solamente la marea.

La bioaumentación, la cual consiste en la adición de microorganismos capaces de degradar hidrocarburos, se utiliza cuando hay varios tipos de contaminantes que no pueden ser degradados por los microorganismos existentes. Existen diferentes microorganismos degradantes de hidrocarburos, con más de 200 especies conocidas de bacterias, hongos y levaduras que son capaces de degradar compuestos tan simples como el metano y compuestos con más de 40 átomos de carbono (Zobell, 1973 en Zhu et al., 2001).

Como la mayoría de los ambientes naturales contienen microorganismos degradantes de hidrocarburos, la bioaumentación no se utiliza muy a menudo. La bioaumentación no es muy eficaz para su uso en situaciones de limpieza de derrames de petróleo por que la adición de microorganismos no nativos a menudo causa competencia con los microorganismos existentes. Esta situación es una razón por la cual no se ha demostrado que la bioaumentación tiene un impacto positivo en la limpieza de las zonas afectadas (Venosa, 1998). Además, la bioaumentación ha sido criticada por que no se sabe si es seguro introducir microorganismos en un nuevo ambiente.

### 1.3.1. Factores que afectan la biorremediación

Las condiciones de la zona contaminada tienen un papel importante para saber si la biorremediación es el método adecuado para la limpieza de zonas afectadas. El éxito de la biorremediación depende de las condiciones físicas y las condiciones químicas del lugar. Entre los parámetros físicos tenemos la temperatura del agua, la superficie contaminada, el oleaje

---

y mareas. Entre los parámetros químicos tenemos las cantidades de oxígeno disponible, el contenido de nutrientes y la composición del petróleo.

La temperatura afecta a la biorremediación por que cambia las propiedades del petróleo e influye en la eficacia de su degradación por los microorganismos (Nedwell, 1999). Cuando se disminuye la temperatura, la viscosidad del aceite es mayor modificando la toxicidad y solubilidad del petróleo (Zhu et al., 2001). Además la temperatura modifica la tasa de crecimiento de los microorganismos; así como, la tasa de degradación de los hidrocarburos. En un estudio realizado por Coulon (2006), se encontró que cuando en una muestra se agregaba petróleo, el crecimiento de microbios degradadores de petróleo, aumentó en dos órdenes de magnitud a 4 °C , más de tres órdenes de magnitud a 12 °C, y más de cuatro órdenes de magnitud a 20 °C.

El tamaño del área cubierta por petróleo es un parámetro importante para que el proceso de biorremediación sea eficaz ya que el crecimiento de microorganismos se da en la interfase entre el agua y el petróleo. Cuanto mayor sea la superficie contaminada por petróleo se tendrá una mayor área de crecimiento de microorganismos y por lo tanto se tendrá una mayor cantidad de microorganismos (Venosa,1996).

Los niveles adecuados de oxígeno y nutrientes son factores que influirán directamente sobre los microorganismos por que su capacidad de sobrevivir en el medio ambiente dependen de las concentraciones de oxígeno y nutrientes. El oxígeno es necesario para la supervivencia de muchos microorganismos y también es importante para las reacciones de degradación de los hidrocarburos. Los nutrientes necesarios especialmente nitrógeno y fósforo, son también necesarios para el crecimiento de los microorganismos y también para la transformación del exceso de carbono presente en el petróleo.

La presencia de olas o mareas son también un factor importante por que aguas turbulentas pueden dispersar y diluir los nutrientes esenciales para los microorganismos. La composición química del petróleo es otro parámetro que afecta la biorremediación. Si el petróleo es muy denso será más difícil para los microorganismos degradarlo, en comparación con petróleos más ligero (Venosa, 1996).

### 1.3.2. Ventajas de la Biorremediación

La biorremediación tiene muchas ventajas sobre los métodos tradicionales de limpieza en los derrames de petróleo. Una de las principales ventajas es la reducción de los costos y del tiempo de trabajo para las personas. Después del derrame del buque Exxon Valdez, el costo de la limpieza de 120 km de costa por biorremediación fue menor que el costo empleando por lavado directo por un día (Atlas, 1995 como referencia por Zhu et al., 2001).

Además, empleando el método de biorremediación, no es necesario el uso de sustancias químicas las cuales pueden ser tóxicas y tener un efecto secundario sobre el ambiente. Empleando este método los organismos que degradan los componentes tóxicos, los transforman en compuestos simples que no representan una amenaza para el ambiente y, esto también

---

elimina la necesidad de retirar y transportar los compuestos tóxicos a otro sitio (Venosa, 1996). Estos beneficios ambientales también hacen de éste un método con gran aceptación por parte del público.

### 1.3.3. Desventajas de la biorremediación

Uno de los inconvenientes de la biorremediación es que es un proceso lento (Venosa, 1996) y en muchos casos es necesario una respuesta rápida ante los eventos de derrame, los cuales pueden ser una gran amenaza para los diferentes sitios contaminados. Además el proceso de biorremediación depende de muchos factores para que sea un método eficaz para la limpieza de los sitios contaminados. Dependiendo del lugar donde se quiera aplicar esta técnica, en ocasiones será difícil llevar los nutrientes apropiados para todas las zonas contaminadas por la dinámica de las costas o mares. Si se produce un derrame de petróleo en alta mar, por lo general hay mucha más energía por las olas, y esto puede causar la pérdida rápida y dilución de los nutrientes proporcionados por la bioestimulación.

En el caso de la bioaumentación, cuando se agregan microorganismos externos, se desarrolla una competencia entre los microbios nativos y los agregados, haciendo este método ineficiente. Otra desventaja de la biorremediación es que es difícil llevar a cabo pruebas de campo en los sitios contaminados debido a los diversos factores y condiciones que no pueden controlarse.

## 1.4. Modelos de dispersión

Modelar y predecir la forma como se transportan y reaccionan sustancias vertidas en cuerpos de agua es un campo de estudio que involucra e interesa a diferentes disciplinas, tales como: la oceanografía, biología marina, ingeniería, matemáticas aplicadas, química, ecología, etc. Por ejemplo, el conocimiento de la forma en como se dispersa, mueve y reacciona una sustancia tóxica vertida en el agua, permite trazar anticipadamente la trayectoria de las sustancias y conocer el tiempo en que tardaría en llegar a una costa o a una población cercana, evaluar con anticipación el impacto de la sustancia en un ecosistema o asentamiento humano, planear estrategias de contención en caso de que dicha sustancia sea un producto tóxico y diseñar estrategias de recuperación de cuerpos de agua contaminados.

Muchos problemas físicos pueden ser modelados por medio de los procesos de difusión, advección, reacción, evaporación y sedimentación, tal como se observa en la figura 1.1, donde se puede observar el efecto de cada proceso en la dispersión de una sustancia vertida en un cuerpo de agua.

A continuación describiremos brevemente los procesos mencionados anteriormente.

**Difusión:** se refiere al movimiento de una sustancia desde una zona de alta concen-

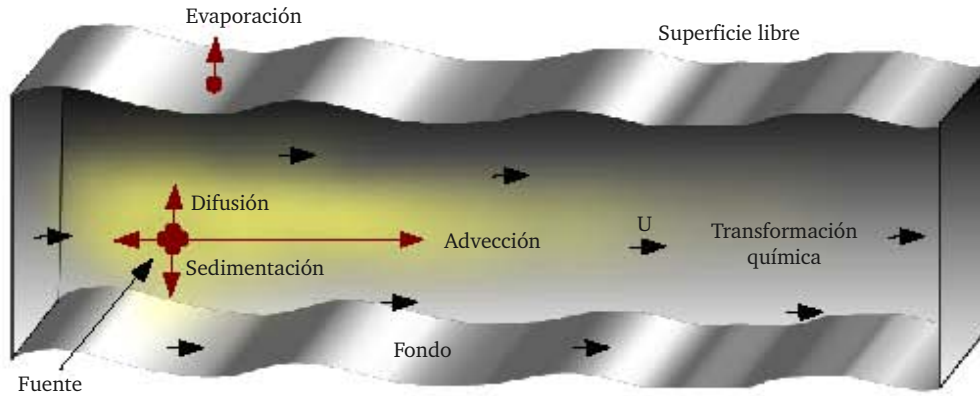


Figura 1.1: Dispersión de una sustancia por los procesos de difusión, advección, transformación química, sedimentación y evaporación.

tracción hasta una zona de menor concentración, debido al efecto del movimiento browniano de las moléculas de la sustancia difundida.

**Advección:** se relaciona con el transporte de especies debido a la presencia de campos de velocidad.

**Transformación química:** es el proceso de interacción entre una sustancia y el medio dando lugar a una reducción o generación de dicha sustancia dentro de un cuerpo de agua.

**Sedimentación:** describe al proceso natural por el cual las partículas más pesadas que el agua, son removidas por la acción de la gravedad.

**Evaporación:** es el proceso físico en el que una sustancia pasa de estado líquido a estado gaseoso tras haber adquirido suficiente energía para vencer la tensión superficial.

Matemáticamente, la concentración de una sustancia  $\phi(\mathbf{r}, t)$  en cada punto del espacio  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ , se obtiene por medio de la siguiente ecuación diferencial parcial, mejor conocida como ecuación de transporte o de difusión-advección.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi + \sigma \phi + \nabla \cdot \vec{\phi}_s = f(r, t), \quad (1.1)$$

donde cada término representa

$\frac{\partial \phi}{\partial t}$  : la variación temporal de la concentración.

$f(r, t)$  : fuentes de emisión.

$\mathbf{U} \cdot \nabla \phi$  : el proceso de advección. (1.2)

$\nabla \cdot \mu \nabla \phi$  : el proceso de difusión.

$\nabla \cdot \vec{\phi}_s$  : cambio de la concentración por la sedimentación.

siendo  $\vec{\phi}_s = -\nu_s \phi \hat{k}$ ,  $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$  es el campo de corrientes presente en el medio,  $\mu(\mathbf{r}, t)$  es el

coeficiente de difusión turbulenta,  $\sigma(\mathbf{r}, t)$  es el coeficiente de transformación por reacciones químicas y  $\nabla$  es el operador nabla definido por:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{k}.$$

La mayor parte de los modelos de dispersión pueden ser clasificados basándose en el marco de referencia usado para su formulación. Hay dos tipos de marcos de referencia, el lagrangiano y euleriano. En los modelos lagrangianos de partículas, el sistema de referencia se mueve con las partículas y la posición instantánea de una partícula puede ser considerada como una función de la posición inicial de la partícula y el tiempo transcurrido. En los modelos eulerianos, el sistema de referencia es estacionario, y las partículas pasan a través de volúmenes de control diferenciales fijos. Además los modelos eulerianos son considerados cuando la carga de partículas es alta, como en el caso de la emisión de una sustancia en un cuerpo de agua, por esta razón se utilizará el sistema de referencia euleriano para el presente estudio.

## 1.5. Planteamiento del problema de biorremediación de sistemas contaminados por petróleo

La estrategia que consideramos para la remediación de un sistema acuático contaminado con petróleo se basa en el uso de la dinámica del flujo de una región limitada  $D$ , con el fin de distribuir un nutriente (nitrógeno y fósforo) y estimular la biodegradación en algunas zonas de interés  $\Omega_i \subset D$ , ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), tal como se muestra en la figura 1.2. Empleando esta estrategia, los nutrientes liberados en el punto  $r_0$  del dominio  $D$  con una tasa de descarga  $Q(t)$  durante un tiempo  $T$ , se propagarán con ayuda de las corrientes hasta llegar a todas las zonas contaminadas. En cada zona  $\Omega_i$  una concentración promedio crítica de nutrientes  $c_i$ , debe mantenerse durante un tiempo  $\tau$  suficiente para estimular adecuadamente el crecimiento de los microorganismos degradantes de petróleo en las zonas  $\Omega_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) (Boufadel et al., 2006). Dicho intervalo de tiempo lo denotamos de la siguiente forma  $[T - \tau, T]$ .

Cabe señalar que la velocidad de descarga  $Q(t)$  adecuada no siempre existe, es decir, a veces esta estrategia falla. En particular, esto puede ocurrir cuando el punto de descarga  $r_0$  no está bien elegido con respecto a la dinámica del flujo y las posiciones de las zonas  $\Omega_i$ , o cuando el tiempo  $T$  de descarga no es lo suficientemente grande como para permitir que el nutriente pueda llegar a todas las zonas  $\Omega_i$ . Diremos que la estrategia es la óptima si se resuelve el problema planteado y al mismo tiempo se minimiza la razón de descarga  $Q(t)$  con el fin de reducir los impactos de los nutrientes en el sistema acuático y disminuir el costo de rehabilitación. De este modo, mediante la introducción de una menor cantidad de nutrientes no solo obtendremos la remediación de las zonas de interés sino también se protegerá al ecosistema.

Las consideraciones mencionadas anteriormente para la estrategia de remediación, se



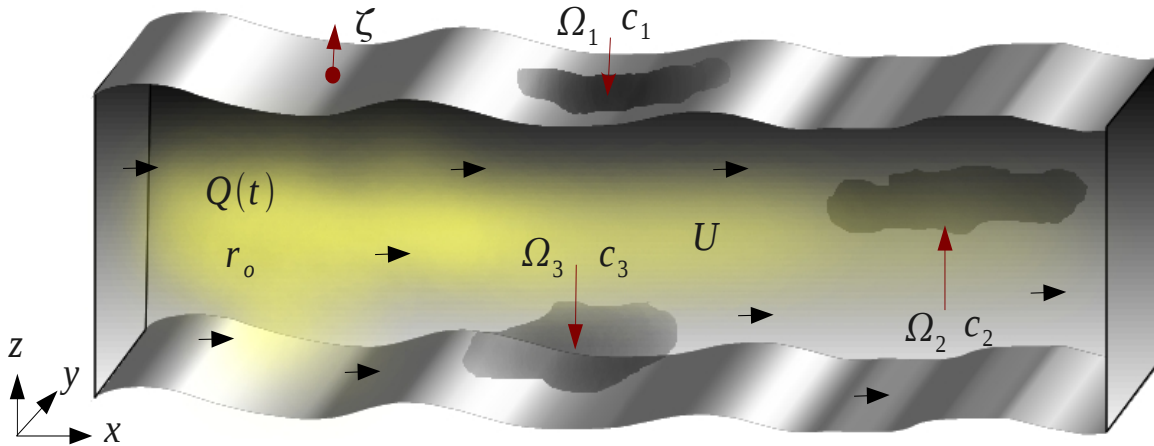


Figura 1.2: Suministro de nutrientes en la posición  $r_o$  a una razón de descarga  $Q(t)$  para la biorremediación de tres zonas contaminadas  $\Omega_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ .

plantean matemáticamente mediante una formulación variacional de la siguiente forma

$$\text{minimizar: } m(Q) = \int_0^T Q^2(t) dt, \quad (1.3)$$

$$\text{sujeto a: } Q(t) > 0, 0 < t < T, \quad (1.4)$$

$$J_i(\phi) = \frac{1}{|\Omega_i| \tau} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega_i} \phi(r, t) dr dt = c_i \quad i = 1, \dots, N. \quad (1.5)$$

donde  $m(Q)$  es el funcional que representa la masa total de los nutrientes liberados en el sistema dentro de un intervalo de tiempo  $[0, T]$ ,  $\phi = \phi(\mathbf{r}, t)$  es la concentración de nutrientes en  $D$ , que se determina con un modelo de dispersión y  $J_i(\phi)$  es la evaluación funcional de la concentración media de nutrientes en la  $i$ -ésima zona  $\Omega_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ). Para simplificar, todas las zonas  $\Omega_i$  consideradas en este trabajo son sin intersección.

## 1.6. Modelo adjunto

G. I. Marchuck (2006) a lo largo de su trayectoria ha mostrado que el estudio de sistemas complejos como son el cambio climático, pronóstico del tiempo a largo plazo, la evaluación de la contaminación ambiental y la asimilación de datos atmosféricos y oceánicos, se puede realizar empleando la teoría del operador adjunto, gracias al principio de dualidad que se deriva de esta teoría. Dicho principio establece que si todos los conceptos que aparecen en una afirmación sobre un sistema, son reemplazados por sus conceptos duales, también se obtiene una afirmación, que es dual a la afirmación original. Este principio de dualidad se ha aplicado satisfactoriamente en muchos campos de las matemáticas, por ejemplo, lógica matemática, geometría, matemáticas numéricas, teoría del control óptimo, etc.

Al desarrollar la teoría de ecuaciones diferenciales, es útil emplear la notación de operadores. Por ejemplo, el modelo de dispersión de una sustancia dado por (1.1) lo podemos reescribir de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + A\phi = f,$$

donde  $A$  es el operador asociado al problema de dispersión, el cual lo definimos de la siguiente manera:

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

el cual puede mostrarse que cumple con las siguientes condiciones

$$A(\phi_1 + \phi_2) = A\phi_1 + A\phi_2 \quad \text{y} \quad A(c\phi) = cA\phi,$$

lo cual implica que el operador  $A$  es lineal.

También recordemos que un espacio de Hilbert  $H$ , es un espacio vectorial sobre el cual se ha definido el producto interno  $(\cdot, \cdot)$ , el producto interno para este trabajo lo definimos de la siguiente forma:

$$(g, h) = \int_D hg dr,$$

donde  $D$  es el dominio de las funciones  $h$  y  $g$ , y  $r$  la coordenada espacial. Además, la norma de la función  $g$  se define de la siguiente forma:

$$\|g\|^2 = (g, g) = \int_D g^2 dr.$$

Observamos que un operador  $A$  es positivo definido si se satisface

$$(A\phi, \phi) \geq 0,$$

para cualquier elemento  $\phi > 0$ .

Uno de los espacios de Hilbert es el espacio de Lebesgue  $L_2[a, b]$  formado por funciones reales  $f$  definidas en  $[a, b]$  cuyos cuadrados son integrables, es decir:

$$\int_a^b f^2 < \infty,$$

y con producto interno definido por:

$$(f, g) = \int_a^b fg dx.$$

## 1.7. Operador adjunto

Con los elementos anteriores es posible dar la definición de un operador adjunto, que es uno de los conceptos fundamentales en el principio de dualidad propuesto por Lagrange a finales del siglo XVIII.

**Definición.** Sea  $H$  un espacio de Hilbert con producto interno dado por  $(\cdot, \cdot)$ , y  $L : H \rightarrow H$  un operador lineal con dominio  $\Phi \in H$  ( $\Phi$  subespacio lineal de  $H$ ). El operador adjunto de  $L$  es un operador lineal  $L^* : H \rightarrow H$ , con dominio  $\Phi^* \in H$  ( $\Phi^*$  subespacio lineal de  $H$ ), que satisface:

$$(L\phi, g) = (\phi, L^*g) \quad \forall \phi \in \Phi \quad y \quad \forall g \in \Phi^*. \quad (1.6)$$

la cual recibe el nombre de identidad de Lagrange.

### 1.7.1. Existencia del operador adjunto

Bajo las características de la definición anterior para el operador  $L$ , el operador adjunto existe, es decir, siempre es posible construir un operador  $L^*$  que cumpla la igualdad (1.6). Para esto, se define el conjunto  $\Phi^*$  como el subconjunto más grande de  $H$  tal que,  $g \in \Phi^*$  si y sólo si la funcional lineal  $\phi \mapsto (L\phi, g)$  es acotada.

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

$$\frac{|(L\phi, ag_1 + bg_2)|}{\|\phi\|} \leq \frac{|a|(L\phi, g_1)| + |b|(L\phi, g_2)|}{\|\phi\|} \leq |a|C_1 + |b|C_2, \quad \phi \in \Phi - \{0\}. \quad (1.7)$$

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

$$(L\phi, g) = (\phi, \nu). \quad (1.8)$$

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

$$(L\phi, g) = (\phi, L^*g), \quad \forall \phi \in \Phi \quad y \quad \forall g \in \Phi^*, \quad (1.9)$$

es decir,  $L^*$  es el operador adjunto.

## 1.8. Unicidad del operador adjunto

En general, el operador adjunto no es único según la definición dada anteriormente, ya que de acuerdo a la construcción anterior, si el operador  $L^*$  se restringe a cualquier subespacio propio de  $\Phi$ , entonces también la restricción satisface (1.6).

Con el fin de establecer unicidad se supone que  $\Phi$  es un subespacio denso en  $H$  y se considera a  $L^*$  con dominio maximal; es decir,  $\Phi^*$  es el mayor subespacio donde se cumple (1.6). Bajo estas condiciones, si  $F^*$  es un adjunto, entonces  $Dom_{F^*} \subset \Phi^*$  (de lo contrario  $L^*$

se puede extender al subespacio  $Dom_{F^*} + \Phi^*$  y  $\Phi^*$  no sería maximal), y por lo tanto, para  $g \in Dom_{F^*}$  se tiene

$$(L\phi, g) = (\phi, F^*g) = (\phi, L^*g), \forall \phi \in \Phi, \quad (1.10)$$

es decir,

$$(\phi, F^*g - L^*g) = 0, \forall \phi \in \Phi. \quad (1.11)$$

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

$$\|\phi_n - h\|^2 = \|\phi_n\|^2 + \|h\|^2 \geq \|h\|^2 > 0, \quad (1.12)$$

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

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

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

$$(L^*g, g) = (g, L^*g) = (Lg, g) > 0, \forall g \in \Phi. \quad (1.13)$$

Por último, se consideran algunos ejemplos sencillos de operador adjunto donde se destaca la importancia de la identidad de Lagrange (1.6).

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

$$(L\phi, g) = (k\phi, g) = (\phi, kg) = (\phi, L^*g), \quad (1.14)$$

y por lo tanto  $L$  es autoadjunto.

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

$$(L\phi, g) = \int_0^1 u \frac{d\phi}{dx} g dx = u \left[ g\phi \Big|_0^1 - \int_0^1 \frac{dg}{dx} \phi dx \right] = \int_0^1 \phi \left( -u \frac{dg}{dx} \right) dx = (\phi, L^*\phi), \quad (1.15)$$

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

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

$$\begin{aligned}
 (L\phi, g) &= \int_0^1 \mu \frac{d^2\phi}{dx^2} g dx \\
 &= \mu \left[ g\phi' \Big|_0^1 - \left( g'\phi \Big|_0^1 - \int_0^1 \frac{d^2g}{dx^2} \phi dx \right) \right] \\
 &= \int_0^1 \phi \left( \mu \frac{d^2g}{dx^2} \right) dx \\
 &= (\phi, L^*g),
 \end{aligned} \tag{1.16}$$

y por lo tanto  $L$  es autoadjunto.

Una de las principales aplicaciones del modelo adjunto es la construcción de principios de conservación, como es el caso de Dymnikov (2002), quien desarrolló leyes integrales de conservación para sistemas de ecuaciones de la hidrodinámica (Marchuck, 2006).

En este trabajo, el modelo adjunto es fundamental para reescribir el problema variacional (1.3)-(1.5) a través de un principio de dualidad, y con esto obtener los parámetros óptimos para la descarga del nutriente en un sistema acuático con el fin de lograr su recuperación de la contaminación de residuos de petróleo.

# Biorremediación en una columna de agua (1-D)

---

En este capítulo se presenta un ejemplo sencillo de biorremediación unidimensional (ideal), donde resolvemos el problema de optimización de nutrientes. Dicho problema se resuelve directamente (series de Fourier) y por medio de la teoría del operador adjunto.

## 2.1. Planteamiento del problema

Consideremos una columna de agua unidimensional a lo largo del eje  $z$ , de longitud unitaria  $0 \leq z \leq 1$ , con varias zonas  $\Omega_i = [\alpha_i, \beta_i]$  ( $i = 1, \dots, N$ ) contaminadas con petróleo, sobre las cuales se desea alcanzar las concentraciones críticas (mínimas) de nutriente  $c_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) durante el intervalo de tiempo  $[T - \tau, T]$  para su total recuperación. Con una fuente de nutrientes ubicada en  $z = z_0$ . En la figura 1.1 se muestra el caso en que se tiene una zona contaminada  $\Omega_1$  y de acuerdo a la estrategia de biorremediación planteada (1.1)-(1.3), el objetivo principal es determinar la razón de descarga de nutrientes óptima  $Q^*(t)$  y la posición óptima  $z_0^*$  de la fuente de nutriente en el lapso de tiempo  $t = [0, T]$ , de tal forma que se minimize la masa total de nutriente liberado.

En este caso de estudio consideramos que los nutriente liberados se distribuyen por difusión a lo largo de la columna y para determinar la concentración de nutrientes  $\phi(z, t)$  es necesario resolver el siguiente problema de valor inicial y condiciones de frontera:

$$\frac{\partial \phi(z, t)}{\partial t} - \mu \frac{\partial^2 \phi(z, t)}{\partial z^2} = Q(t) \delta(z - z_0), \quad 0 \leq z \leq 1, \quad (2.1)$$

$$\mu \frac{\partial \phi(z, t)}{\partial t} = 0 \quad \text{en } z = 0, \quad (2.2)$$

$$\mu \frac{\partial \phi(z, t)}{\partial z} = -\xi \phi(z, t) \quad \text{en } z = 1, \quad (2.3)$$

$$\phi(z, t) = 0 \quad \text{en } t = 0. \quad (2.4)$$

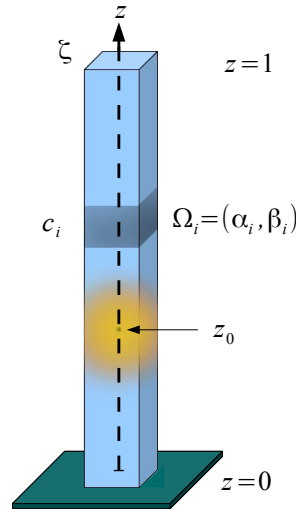


Figura 2.1: Biorremediación en una columna de agua con una zona contaminada ( $\Omega_1 = [\alpha_1, \beta_1]$ ), empleando una fuente de nutrientes ubicada en  $z = z_0$

Donde (2.1) representa la ecuación de difusión y el término de la derecha (forzamiento) representa la fuente de nutrientes ubicada en  $z = z_0$  con una razón de descarga  $Q(t)$ . La condición (2.2) representa la frontera del fondo de la columna de agua, la cual asegura que en este sitio no existirá flujo de nutrientes. La condición (2.3) representa la disminución de nutrientes por evaporación en la superficie en  $z = 1$ , la cual consideramos proporcional a la concentración de nutrientes sobre la superficie, siendo  $\xi$  el factor de evaporación del nutriente. Por último la ecuación (2.4) representa la condición inicial, es decir, no tenemos nutrientes en la columna de agua en el tiempo inicial.

## 2.2. Método directo

De acuerdo a la teoría de ecuaciones diferenciales, la solución de la ecuación de difusión (2.1) (ecuación diferencial lineal no homogénea de segundo orden con coeficientes constantes) se obtiene sumando la solución general de la ecuación homogénea asociada a (2.1) y una solución particular de (2.1). Por lo tanto, primero calculamos la solución general de (2.1) en su forma homogénea,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0, \quad (2.5)$$

empleando el método de separación de variables. Se considera a  $\phi(z, t)$  como el producto de dos funciones

$$\phi(z, t) = Z(z)T(t),$$

y sustituyendo en (2.5), obtenemos la siguiente relación

$$\frac{1}{\mu T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = \frac{1}{Z(z)} \frac{d^2 Z(z)}{dz^2} = -\lambda^2,$$

donde se han separado las variables, es decir, el lado derecho depende sólo de  $z$  y el lado izquierdo depende sólo de  $t$ . De esta forma se considera que ambos lados de la ecuación son iguales a una constante de separación igual a  $-\lambda^2$ , dando lugar a las siguientes ecuaciones

$$\frac{dT(t)}{dt} + \mu\lambda^2 T(t) = 0, \quad (2.6)$$

$$\frac{d^2 Z(z)}{dz^2} + \lambda^2 Z(z) = 0, \quad (2.7)$$

$$\mu \frac{dZ(z)}{dz} = 0 \quad \text{en } z = 0, \quad (2.8)$$

y

$$\mu \frac{dZ(z)}{dz} = -\xi Z(z) \quad \text{en } z = 1, \quad (2.9)$$

donde (2.8) y (2.9) son las condiciones de frontera modificadas por el método de separación de variables. Notemos que el problema (2.7)-(2.9) es un problema del tipo Sturm-Liouville, es decir, existen valores  $\lambda_n$  para los cuales existen soluciones no triviales  $Z(z) \neq 0$ . A dichos valores  $\lambda_n$  se les denomina eigenvalores y sus correspondientes soluciones no triviales eigenfunciones  $Z_n(z)$ , los cuales determinaremos a continuación.

De acuerdo a la teoría de ecuaciones diferenciales, las soluciones generales de (2.6) y (2.7) son

$$\begin{aligned} Z_n(x) &= a_n \cos(\lambda_n z) + b_n \sin(\lambda_n z), \\ T_n(t) &= e^{-\mu\lambda_n^2 t}, \end{aligned}$$

dado que obtendremos  $n$  eigenvalores  $\lambda_n$ .

Aplicando la condición de frontera (2.8), se concluye que  $b_n = 0$ , y aplicando la condición de frontera (2.9), obtenemos la siguiente ecuación trascendente

$$\tan(\lambda_n) = \frac{\xi/\mu}{\lambda_n}, \quad (2.10)$$

con la cual es posible determinar los eigenvalores  $\lambda_n$  y sus correspondientes eigenfunciones  $Z_n(z) = \cos(\lambda_n z)$ . La gráfica 2.2 muestra los eigenvalores cuando  $\xi/\mu = 1$ , se observa que este conjunto es un conjunto infinito.

Para tener una base  $Z_n(z)$  ortonormal, calculamos  $\|Z_n(z)\|$

$$\gamma_n = \|Z_n(z)\| = (Z_n(z), Z_n(z))^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\int_0^1 \cos^2(\lambda_n z) dz} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\sin(2\lambda_n z)}{2\lambda_n} \right)}, \quad (2.11)$$

de esta forma las eigenfunciones normalizadas son  $Z_n(z) = \cos(\lambda_n z)/\gamma_n$ .

Por lo tanto, aplicando el principio de superposición la solución general de (2.5) es:

$$\phi(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\mu\lambda_n^2 t} \frac{\cos(\lambda_n z)}{\gamma_n}. \quad (2.12)$$



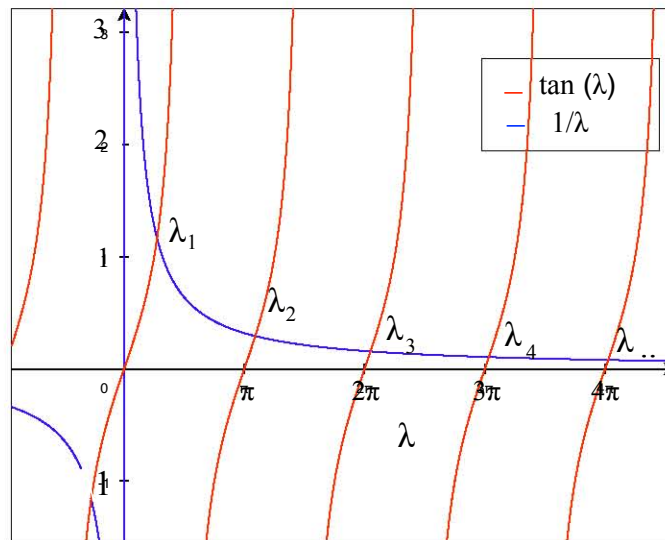


Figura 2.2: Cálculo de eigenvalores  $\lambda_n$ , cuando  $\xi/\mu = 1$ .

Para obtener la solución particular de (2.1) observamos que no es posible resolver la ecuación empleando el método de separación de variables. Entonces resolvemos (2.1) por el método de variación de parámetros, también conocido como el método de expansión en eigenfunciones. Siendo específicos, buscaremos una solución del problema de condiciones a la frontera como una serie de Fourier coseno de la siguiente forma

$$\phi(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n(t) \frac{\cos(\lambda_n z)}{\gamma_n}, \quad (2.13)$$

cuyos coeficientes  $A_n(t)$  son funciones diferenciables dependientes del tiempo, y las funciones coseno son el conjunto de eigenfunciones  $Z_n(z)$  de la ecuación (2.1) en su forma homogénea.

Desarrollamos también el término del forzamiento de (2.1) en una serie coseno de Fourier, es decir

$$\delta(z - z_0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \frac{\cos(\lambda_n z)}{\gamma_n},$$

donde los coeficientes de Fourier  $c_n$  están dados por:

$$c_n = \int_0^1 \delta(z - z_0) \frac{\cos(\lambda_n z)}{\gamma_n} = \frac{\cos(\lambda_n z_0)}{\gamma_n},$$

de esta forma tenemos

$$\delta(z - z_0) = \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z_0) \frac{\cos(\lambda_n z)}{\gamma_n^2}. \quad (2.14)$$

Sustituyendo (2.13) y (2.14) en (2.1), obtenemos

$$\sum_{n=1}^{\infty} A'_n(t) \frac{\cos(\lambda_n z)}{\gamma_n} + \mu \lambda_n^2 \sum_{n=1}^{\infty} A_n(t) \frac{\cos(\lambda_n z)}{\gamma_n} = Q(t) \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z_0) \frac{\cos(\lambda_n z)}{\gamma_n^2},$$

y comparando los coeficientes de los términos coseno en ambos lados, obtenemos una ecuación diferencial lineal de primer orden no homogénea para los coeficientes  $A_n(t)$

$$A'_n(t) + \mu \lambda_n^2 A_n(t) = Q(t) \frac{\cos(\lambda_n z_0)}{\gamma_n},$$

la cual tiene como solución

$$A_n(t) = e^{-\mu \lambda_n^2 t} \left[ \int Q(t) \frac{\cos(\lambda_n z_0)}{\gamma_n} e^{\mu \lambda_n^2 t} dt + c \right], \quad (2.15)$$

De esta forma la solución general de (2.1) está dada por:

$$\phi(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\mu \lambda_n^2 t} \left[ \int Q(t) \frac{\cos(\lambda_n z_0)}{\gamma_n} e^{\mu \lambda_n^2 t} dt + c \right] \frac{\cos(\lambda_n z)}{\gamma_n}. \quad (2.16)$$

donde los eigenvalores  $\lambda_n$  se obtienen resolviendo numéricamente la ecuación trascendente (2.10). Una vez calculada la concentración, es posible calcular la concentración promedio de nutriente en cada zona contaminada  $\Omega_i$ , es decir:

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

Podemos observar que  $\phi(z, t)$  y  $J_i(\phi)$  dependen explícitamente de la razón de descarga  $Q(t)$  y del sitio de la fuente  $z_0$ , los cuales son los parámetros que deseamos conocer. Esta ecuación no nos permite resolver completamente el problema de optimización de nutrientes, ya que no es posible despejar a  $Q(z)$  y  $z_0$ . Para poder resolver el problema de optimización, en las siguientes secciones consideramos dos casos particulares de la razón de descarga  $Q(t)$ .

### 2.2.1. Razón de descarga constante $Q(t)=Q$

En este caso consideramos que la razón de descarga es invariante en el tiempo, es decir  $Q(t) = Q$ . Por lo tanto los coeficientes  $A_n(t)$  están dados por

$$A_n(t) = \frac{1}{\mu \lambda_n^2} \left( Q \frac{\cos(\lambda_n z_0)}{\gamma_n} + c e^{-\mu \lambda_n^2 t} \right),$$

y para determinar la constante  $c$ , aplicamos la condición inicial (2.4), lo cual implica que  $A_n = 0$  y  $c = -Q \cos(\lambda_n z_0)$ , por lo tanto tenemos

$$A_n(t) = \frac{Q \cos(\lambda_n z_0)}{\mu \lambda_n^2 \gamma_n} \left( 1 - e^{-\mu \lambda_n^2 t} \right),$$

de esta manera obtenemos la solución general

$$\phi(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Q}{\mu\lambda_n^2\gamma_n} \left(1 - e^{-\mu\lambda_n^2 t}\right) \cos(\lambda_n z_0) \cos(\lambda_n z). \quad (2.17)$$

Una vez conocida la concentración  $\phi(z, t)$  de nutriente sobre la columna de agua, podemos calcular la concentración promedio  $c_i$  de nutriente en cada zona contaminada, donde

$$c_i = \frac{1}{\tau(\beta_i - \alpha_i)} \int_{T-\tau}^T \int_{\alpha_i}^{\beta_i} \phi(z, t) dz dt.$$

Sustituyendo (2.17) en la ecuación anterior, obtenemos

$$c_i = \frac{Q}{\tau(\beta_i - \alpha_i)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_n z_0)}{\mu\gamma_n^2\lambda^3} [\text{sen}(\lambda_n\beta_i) - \text{sen}(\lambda_n\alpha_i)] \times \left[ \tau + \frac{e^{-\mu\lambda_n^2 T}}{\mu\lambda_n^2} \left(1 - e^{\mu\lambda_n^2 \tau}\right) \right]. \quad (2.18)$$

La expresión anterior la podemos reescribir de la siguiente forma:

$$c_i = \frac{1}{\tau(\beta_i - \alpha_i)} \int_{T-\tau}^T \int_{\alpha}^{\beta} \phi(z, t) dz dt = QF_i(z_0) \quad (2.19)$$

donde

$$F_i(z_0) = \frac{1}{T(\beta_i - \alpha_i)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_n z_0)}{\mu\lambda^3} [\text{sen}(\lambda_n\beta_i) - \text{sen}(\lambda_n\alpha_i)] \times \left[ \tau + \frac{e^{-\mu\lambda_n^2 T}}{\mu\lambda_n^2} \left(1 - e^{\mu\lambda_n^2 \tau}\right) \right], \quad (2.20)$$

la cual nos ayudará a encontrar el sitio óptimo de descarga.

La masa total suministrada  $m(Q)$ , dada por la ecuación (1.3) para este caso, resulta ser

$$m(Q) = \int_0^T Q^2(t) dt = Q^2 T, \quad Q(t) = Q, \quad (2.21)$$

y a partir de (2.19) podemos despejar a  $Q$ . Sustituyendo en la expresión anterior, obtenemos

$$m(Q) = \frac{c_i^2}{F_i^2(z_0)} T. \quad (2.22)$$

Si se tiene una zona contaminada ( $N = 1$ ), el funcional de masa  $m(Q)$  es

$$m(Q) = \frac{c_1^2}{F_1^2(z_0)} T. \quad (2.23)$$

el cual se minimiza cuando la función  $F_1(z_0)$  es máxima, de esta manera, el sitio óptimo de descarga va a ser el punto  $z_0^*$  tal que maximice  $F_1(z_0)$ . Y la razón de descarga óptima está dada por:

$$Q^* = \frac{c_1}{F_1(z_0^*)}.$$

Además el problema de optimización va a tener solución si y solo si la función  $F_1(z)$  es una función positiva en  $0 < z < 1$ .

Para el caso en que tenemos dos zonas contaminadas ( $N = 2$ ), aplicando las ecuaciones (2.19) y (2.23), tenemos:

$$c_1 = QF_1(z_0^*), \quad c_2 = QF_2(z_0^*),$$

y el funcional de masa  $m(Q)$  resulta ser

$$m(Q) = \frac{c_1^2}{F_1^2(z_0^*)} \sqrt{T} = \frac{c_2^2}{F_2^2(z_0^*)} \sqrt{T}$$

el cual se minimiza cuando se cumple la siguiente relación

$$G(z_0) = c_2F_1(z_0) - c_1F_2(z_0) = 0 \quad (2.24)$$

con lo cual el sitio óptimo de descarga  $z_0^*$ , está dado por el punto donde la función  $G(z_0)$  se anula, es decir,  $G(z_0^*) = 0$ . Y la razón de descarga óptima, cuando tenemos dos zonas contaminadas, está dada por:

$$Q^* = \frac{c_1}{F_1(z_0^*)} = \frac{c_2}{F_2(z_0^*)} \quad (2.25)$$

Cuando hay más de dos zonas ( $N > 2$ ), el sitio óptimo debe ser solución del siguiente sistema de ecuaciones

$$G_i(x_0) = c_1F_i(x_0) - c_iF_1(x_0) = 0, \quad i = 3, \dots, N \quad (2.26)$$

el cual minimiza el funcional de masa  $m(Q)$ , siendo la razón de descarga óptima  $Q^* = c_1/F_1(z_0^*)$ . Además, notemos que el problema de optimización tiene solución si y sólo si para cada  $i$ ,  $F_i(z_0) > 0$  en un intervalo  $I \subset [0, 1]$  y el sistema de ecuaciones tiene al menos una raíz  $z_0$  en  $I$ .

### 2.2.2. Razón de descarga variable $Q(t)$

Para este caso, consideramos que la razón de descarga  $Q(t)$  tiene la siguiente forma

$$Q(t) = \sum_{k=1}^s Q_k \psi_k(t). \quad (2.27)$$

donde  $s$  es el número de términos que tendrá la razón de descarga y la función  $\psi_k$  está definida de la siguiente forma

$$\psi_k = \begin{cases} 1 & (k-1)\epsilon < t < k\epsilon \\ 0 & t = [(k-1)\epsilon, k\epsilon] \end{cases} \quad \text{con } k = 1, \dots, s. \quad (2.28)$$

siendo  $\epsilon = T/s$ , el lapso de tiempo donde se descarga nutriente a una razón constante  $Q_k$ . En la figura (2.3) se puede observar un ejemplo de razón de descarga  $Q(t)$  de acuerdo a las definiciones anteriores. En la figura (2.4) se muestra el comportamiento de la función  $\psi_k(t)$ .

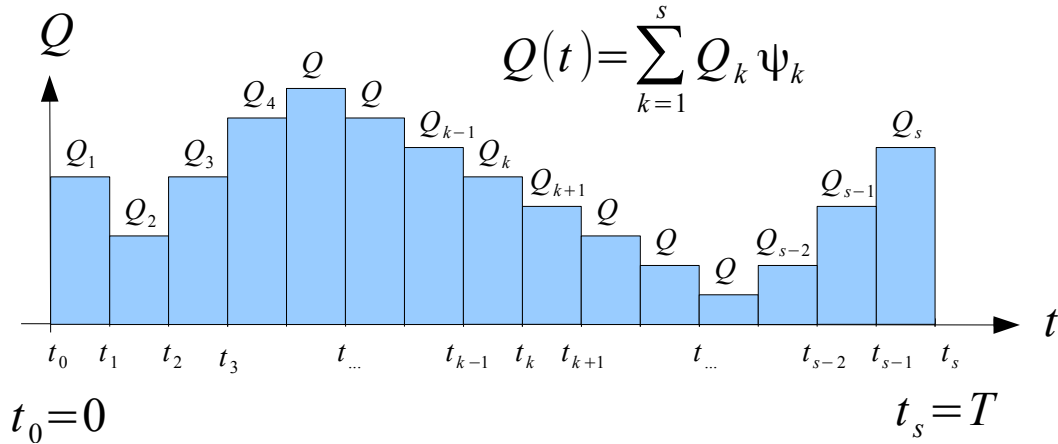


Figura 2.3: Razón de descarga variable  $Q(t)$

Sustituyendo (2.27) en la ecuación (2.16), es posible llegar a la siguiente expresión para la concentración de nutrientes

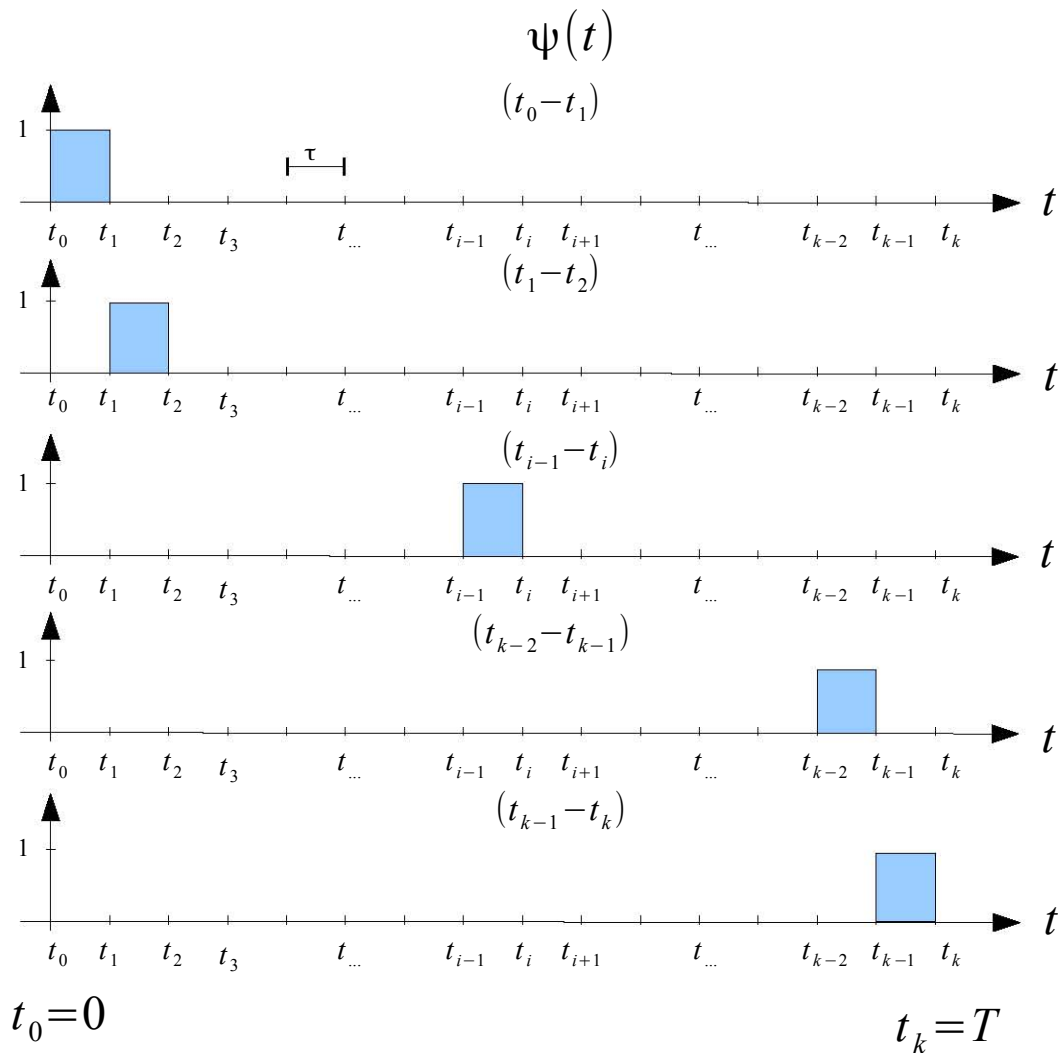
$$\phi(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\mu\lambda_n^2 t} \left[ \sum_{k=1}^s Q_k \int_0^t \psi_k(t) e^{\mu\lambda_n^2 t} dt \right] \frac{\cos(\lambda_n z_0)}{\gamma_n^2} \cos(\lambda_n z). \quad (2.29)$$

Al igual que en el caso anterior, después de calcular la concentración de nutrientes, podemos calcular la concentración promedio  $c_i$  en cada zona contaminada, la cual está dada por (1.5)

$$c_i = \frac{1}{\tau(\beta_i - \alpha_i)} \int_{T-\tau}^T \int_{\alpha}^{\beta} \phi(z, t) dz dt, \quad (2.30)$$

sustituyendo (2.29) en (2.30), obtenemos:

$$c_i = \frac{1}{\tau(\beta - \alpha)} \sum_{n=1}^{\infty} \int_{T-\tau}^T \left\{ e^{-\mu\lambda_n^2 t} \left[ \sum_{k=1}^s Q_k \int_0^t \psi_k(t) e^{\mu\lambda_n^2 t} dt \right] \right\} dt \times \frac{\cos(\lambda_n z_0)}{\lambda_n \gamma_n^2} [\text{sen}(\lambda_n \beta_i) - \text{sen}(\lambda_n \alpha_i)]. \quad (2.31)$$

Figura 2.4: Base unitaria  $\psi$ 

La expresión anterior puede reescribirse de la siguiente manera

$$c_i = \sum_{k=1}^s Q_k M_{k,i}, \quad (2.32)$$

donde

$$M_{k,i} = \frac{1}{\tau(\beta - \alpha)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_n z_0)}{\lambda_n \gamma_n^2} [\cos(\lambda_n \beta_i) - \cos(\lambda_n \alpha_i)] \eta, \quad (2.33)$$

con

$$\eta = \int_{T-\tau}^T \left\{ e^{-\mu \lambda_n^2 t} \left[ \int_0^t \psi_k(t) e^{\mu \lambda_n^2 t} dt \right] \right\} dt. \quad (2.34)$$

Ahora, la masa total de nutriente, está dado por:

$$m(Q) = \int_0^T Q(t)^2 dt = \int_0^T \left[ \sum_{k=1}^s Q_k \psi_k \right]^2 dt = \sum_{k=1}^s Q_k^2 \int_0^T \psi_k^2 dt = \epsilon \sum_{k=1}^s Q_k^2. \quad (2.35)$$

Por lo tanto, el problema de optimización (1.3)-(1.5), toma la siguiente forma:

$$\text{minimizar: } m(Q) = \sum_{n=1}^s \epsilon_n Q_n^2, \quad (2.36)$$

$$\text{sujeto a: } Q_i > 0, i = 1, 2, 3, \quad y \quad (2.37)$$

$$c_i = \sum_{k=1}^s M_{k,i} Q_k, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.38)$$

que en forma matricial, la última condición queda de la siguiente manera.

$$\begin{pmatrix} M_{1,1} & \cdots & M_{k,1} & \cdots & M_{s,1} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ M_{1,n} & \cdots & M_{k,n} & \cdots & M_{s,n} \\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{1,N} & \cdots & M_{k,N} & \cdots & M_{s,N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_1 \\ \vdots \\ Q_k \\ \vdots \\ Q_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

para obtener los  $Q_k$  que minimizan el funcional  $m(Q)$ , empleamos la función `lsqin` del Matlab. El inconveniente en este caso está en la definición de la razón de descarga ya que para resolver este problema es necesario realizar  $n * s$  integrales por cada término de la matriz  $M_{k,i}$ , lo cual requiere un mayor esfuerzo computacional cuando consideramos valores grandes de  $n$  (términos de la serie de Fourier) y  $s$  (términos de la razón de descarga).

Además, con este método no es posible obtener una expresión para obtener el sitio óptimo de descarga. Lo vamos a poder obtener evaluando el funcional de masa como función del sitio de descarga, es decir  $m(z_0)$ , y el punto para el cual se minimiza  $m(z_0)$ , será el sitio óptimo de descarga.

### 2.3. Método adjunto

A continuación resolvemos el problema (2.1)-(2.4), empleando la teoría del operador adjunto. De (2.1) se tiene que el operador del modelo de difusión es

$$L = -\mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}, \quad (2.40)$$

y para obtener el operador adjunto de (2.40), empleamos la identidad de Lagrange (1.6), la cual establece que

$$(L\phi, g) = (\phi, L^*g) \quad \text{donde} \quad L = -\mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}. \quad (2.41)$$

Al calcular  $(L\phi, g)$  e integrando por partes dos veces, obtenemos

$$\begin{aligned}
(L\phi, g) &= \int_0^1 -\mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} g dz \\
&= -\mu g \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_0^1 + \mu \frac{\partial g}{\partial z} \phi \Big|_0^1 + \int_0^1 \phi \left( -\mu \frac{\partial^2 g}{\partial z^2} \right) \phi dz \\
&= -\mu g \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_0^1 + \mu \frac{\partial g}{\partial z} \phi \Big|_0^1 + (\phi, L^* g),
\end{aligned} \tag{2.42}$$

donde  $L^* = -\mu \frac{\partial^2 g}{\partial z^2}$ .

De la expresión anterior, podemos observar que el operador  $L$  es auto adjunto cuando

$$-\mu g \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_0^1 + \mu \frac{\partial g}{\partial z} \phi \Big|_0^1 = 0, \tag{2.43}$$

lo cual se obtiene bajo las siguientes condiciones

$$\mu \frac{\partial g(z, t)}{\partial t} = 0 \quad \text{en } z = 0, \tag{2.44}$$

$$\mu \frac{\partial g(z, t)}{\partial z} = -\xi g(z, t) \quad \text{en } z = 1, \tag{2.45}$$

$$g(z, t) = 0 \quad \text{en } t = T. \tag{2.46}$$

y de esta forma tenemos que el operador  $L$  es auto adjunto.

Multiplicamos (2.1) por  $g = g(z, t)$  y tomando las integrales sobre el dominio del espacio y tiempo  $(0, 1) \times (0, T)$ , obtenemos

$$\int_0^T \int_0^1 g \frac{\partial \phi}{\partial t} dz dt + \int_0^T \int_0^1 g L \phi dz dt = \int_0^T \int_0^1 g Q(t) \delta(z - z_0) dz dt. \tag{2.47}$$

Integrando por partes la primera integral de (2.46), y usando la condición (2.46) y  $g(z, T) = 0$ , resulta

$$\int_0^T \int_0^1 g \frac{\partial \phi}{\partial t} dz dt = - \int_0^T \int_0^1 \phi \frac{\partial g}{\partial t} dz dt,$$

con lo cual la ecuación (2.47) la podemos reescribir de la siguiente forma:

$$\int_0^T \int_0^1 \phi \left\{ -\frac{\partial g}{\partial t} + L^* g \right\} dz dt = \int_0^T Q(t) g(z_0, t) dt. \tag{2.48}$$

donde se ha aplicado la identidad de Lagrange y las propiedades de la función delta de Dirac.

De la ecuación anterior podemos considerar la siguiente relación

$$-\frac{\partial g}{\partial t} + L^* g = p(r, t), \tag{2.49}$$



donde el forzamiento  $p(z, t)$  lo definimos de la siguiente forma

$$p(z, t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau|\Omega|} & z \in \Omega \text{ y } t \in (T - \tau, T) \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (2.50)$$

donde  $|\Omega|$  es la longitud de  $\Omega = [\alpha, \beta]$ , y  $\tau$  es el tiempo requerido para que el nutriente mantenga la concentración promedio crítica en una zona. Con esta definición de  $p(z, t)$  podemos observar que el término de la izquierda de (2.47) es en realidad igual a la concentración promedio de nutriente en la zona  $\Omega$  afectada por la contaminación, es decir,

$$\int_0^T \int_0^1 \phi \left\{ -\frac{\partial g}{\partial t} + L^*g \right\} dr dt = \int_0^T \int_{\Omega} \phi p(r, t) dr dt = \frac{1}{\tau|\Omega|} \int_{T-\tau}^T \int_{\alpha}^{\beta} \phi dr dt = J(\phi), \quad (2.51)$$

igualando (2.48) con (2.51) obtenemos

$$J(\phi) = \int_0^T g(z_o, t)Q(t)dt = c, \quad (2.52)$$

a esta última relación se le conoce como principio de dualidad.

Para el caso en que tengamos varias zonas contaminadas  $\Omega_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ), de la expresión anterior, las concentraciones promedio  $c_i$  de nutriente de cada zona resulta ser:

$$J_i(\phi) = \int_0^T g_i(z_o, t)Q(t)dt = c_i. \quad (2.53)$$

Con el resultado anterior el problema variacional (1.3)-(1.5) toma la siguiente forma

$$\text{minimizar: } m(Q) = \int_0^T Q^2(t)dt, \quad (2.54)$$

$$\text{sujeto a: } Q(t) > 0, 0 < t < T, \quad \text{y,} \quad (2.55)$$

$$\int_0^T g_i(z_o, t)Q(t)dt = c_i. \quad (2.56)$$

siendo  $g_i(z_o, t)$  la solución adjunta para cada zona  $\Omega_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ).

Con esta formulación variacional podemos observar que las soluciones adjuntas  $g_i(z_o, t)$  son independientes de la razón de descarga  $Q(t)$ . Las cuales están determinadas por el proceso de difusión sobre la columna de agua y pueden considerarse como funciones de peso que caracterizan el impacto de la descarga del nutriente en el punto  $z_o$ , sobre cada zona  $\Omega_i$ . Por lo tanto, las soluciones adjuntas son consideradas como funciones de información o de influencia en el problema de control.

### 2.3.1. Solución de la ecuación adjunta

Para determinar las soluciones adjuntas  $g_i(z, t)$ , es necesario resolver el problema de valor final dado por (2.49) y (2.44)-(2.46)

$$-\frac{\partial g_i(z, t)}{\partial t} - \mu \frac{\partial^2 g_i(z, t)}{\partial z^2} = p_i(z, t) \quad z \leq z \leq 1, \quad (2.57)$$

$$\mu \frac{\partial g_i(z, t)}{\partial t} = 0 \quad \text{en } z = 0, \quad (2.58)$$

$$\mu \frac{\partial g_i(z, t)}{\partial z} = -\xi g_i(z, t) \quad \text{en } z = 1, \quad (2.59)$$

$$g_i(z, t) = 0 \quad \text{en } t = T. \quad (2.60)$$

el cual se puede transformar en un problema de condicion inicial considerando el siguiente cambio de variable  $t' = T - t$ , obteniendo:

$$\frac{\partial g_i(z, t')}{\partial t'} - \mu \frac{\partial^2 g_i(z, t')}{\partial z^2} = p(z, t') \quad z \leq z \leq 1, \quad (2.61)$$

$$\mu \frac{\partial g_i(z, t')}{\partial t'} = 0 \quad \text{en } z = 0, \quad (2.62)$$

$$\mu \frac{\partial g_i(z, t')}{\partial z} = -\xi g_i(z, t') \quad \text{en } z = 1, \quad (2.63)$$

$$g_i(z, t') = 0 \quad \text{en } t' = 0. \quad (2.64)$$

Podemos notar que el problema anterior (2.61)-(2.64) es idéntico al problema (2.1)-(2.4). Por lo tanto podemos utilizar la base de funciones  $Z_n$  para obtener la solución adjunta  $g_i(z, t')$ . Así, consideremos a  $g_i(z, t')$  como una serie de Fourier de la siguiente forma:

$$g_i(z, t') = \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,i}(t') \frac{\cos(\lambda_n z)}{\gamma_n}, \quad (2.65)$$

donde los eigenvalores  $\lambda_n$  de las funciones base  $Z_n$ , están dados por:

$$\tan(\lambda_n) = \frac{\zeta/\mu}{\lambda_n}. \quad (2.66)$$

Desarrollamos también el forzamiento  $p(z, t')$  en serie de Fourier

$$p_i(z, t') = \sum_{n=1}^{\infty} d_{n,i} \cos(\lambda_n z), \quad (2.67)$$

donde los coeficientes  $d_{n,i}$  están dados por:

$$d_{n,i} = \int_0^1 p(z, t') \cos(\lambda_n z) = \begin{cases} \frac{1}{\tau|\Omega|} \frac{1}{\lambda_n} [\text{sen}(\lambda_n \beta_i) - \text{sen}(\lambda_n \alpha_i)] & z \in \Omega_i \text{ y } t' \in (0, \tau) \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (2.68)$$

Ahora sustituyendo  $p_i(z, t')$  y  $g_i(z, t')$  en (3.54) obtenemos

$$\sum_{n=1}^{\infty} A'_{n,i}(t') \cos(\lambda_n z) + \mu \lambda_n^2 \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,i}(t') \cos(\lambda_n z) = \sum_{n=1}^{\infty} d_{n,i} \cos(\lambda_n z),$$

y comparando los coeficientes de los términos coseno en ambos lados, obtenemos una ecuación diferencial lineal de primer orden no homogénea para los coeficientes  $A_n(t')$

$$A'_{n,i}(t') + \mu \lambda_n^2 A_{n,i}(t') = d_{n,i},$$

la cual tiene como solución

$$A_n(t') = e^{-\mu \lambda_n^2 t'} \int_0^{t'} e^{\mu \lambda_n^2 t'} d_{n,i} dt', \quad (2.69)$$

donde se ha considerado la condición  $g_i(z, 0) = 0$  (2.62), y sustituyendo los coeficientes de  $d_{n,i}$  (2.68), obtenemos

$$A_{n,i}(t') = \begin{cases} \frac{1}{\mu \lambda_n^2} (1 - e^{-\mu \lambda_n^2 t'}) d_{n,i} & t < \tau \\ \frac{1}{\mu \lambda_n^2} (e^{-\mu \lambda_n^2 (t-\tau)} - e^{-\mu \lambda_n^2 t}) d_{n,i} & t > \tau \end{cases} \quad (2.70)$$

de esta forma obtenemos las funciones adjuntas  $g_i(z, t')$  y aplicando el cambio de variable  $t = T - t'$  obtenemos la solución  $g_i(z, t)$ . Utilizando el principio de dualidad (2.52) podemos calcular la concentración promedio de nutriente en la  $i$ -ésima zona contaminada. Al igual que en la sección anterior para poder resolver el problema de control, consideramos los mismos casos para la razón de descarga  $Q$ .

### 2.3.2. Razón de descarga constante $Q(t) = Q$

De acuerdo al principio de dualidad (2.52), y considerando que  $Q(t) = Q$ , tenemos

$$c_i = \int_0^T Q(t) g_i(z_0, t) dt = Q \int_0^T g_i(z_0, t) dt, \quad (2.71)$$

y al sustituir  $g_i(z_0, t)$  obtenemos

$$c_i = \frac{Q}{\tau (\beta_i - \alpha_i)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_n z_0)}{\mu \lambda_n^3} [\text{sen}(\lambda_n \beta_i) - \text{sen}(\lambda_n \alpha_i)] \times \left[ \tau + \frac{e^{-\mu \lambda_n^2 T}}{\mu \lambda_n^2} (1 - e^{\mu \lambda_n^2 \tau}) \right], \quad (2.72)$$

y como era de esperar, se llegó a la misma expresión para la concentración promedio empleando el método directo y por el método del operador adjunto, en donde la función  $F_i(z_0)$  obtenida por el método directo resultó ser

$$F_i(z_0) = \int_0^T Q(t) g_i(z_0, t) dt. \quad (2.73)$$

Para el caso en que tenemos una zona contaminada, de (2.73) obtenemos la expresión para la razón de descarga

$$Q = \frac{c_1}{F_1(z_0)}, \quad (2.74)$$

y el funcional de masa  $m(Q)$  resulta ser

$$m(Q) = \frac{c_1^2}{F_1^2(z_0)}, \quad (2.75)$$

el cual se minimiza cuando la función  $F_1(z_0)$  es máxima, de esta manera, el sitio óptimo de descarga va a ser el punto  $z_0^*$  tal que maximice  $F_1(z_0)$  o que el área bajo la curva de  $g_1(z_0^*, t)$  sea máxima en el intervalo de tiempo  $(0, T)$ . Por lo tanto la razón de descarga óptima está dada por:

$$Q^* = \frac{c_1}{F_1(z_0^*)}, \quad (2.76)$$

además, el problema de optimización va a tener solución si y solo si la función  $F_1(z)$  es una función positiva en  $0 < z < 1$ .

Si tenemos dos zonas ( $N = 2$ ) contaminadas:

$$c_1 = Q \int_0^1 g_1(z_0, t) dt = QF_1, \quad c_2 = Q \int_0^1 g_2(z_0, t) dt = QF_2, \quad (2.77)$$

y el funcional de masa  $m(Q)$  resulta ser

$$m(Q) = \frac{c_1^2}{F_1^2(z_0^*)} T = \frac{c_2^2}{F_2^2(z_0^*)} T, \quad (2.78)$$

el cual se minimiza cuando se cumple la siguiente relación

$$G(z_0) = c_2 F_1(z_0) - c_1 F_2(z_0) = 0, \quad (2.79)$$

por lo tanto el sitio óptimo de descarga  $z_0^*$ , está dado por el punto donde la función  $G(z_0)$  se anula, es decir,  $G(z_0^*) = 0$ . Y la razón de descarga óptima cuando tenemos dos zonas contaminadas está dada por:

$$Q^* = \frac{c_1}{F_1(z_0^*)} = \frac{c_2}{F_2(z_0^*)}. \quad (2.80)$$

### 2.3.3. Razón de descarga variable $Q(t)$

Al igual que en la sección (2.2.2), consideramos a la razón de descarga  $Q(t)$  de la siguiente forma

$$Q(t) = \sum_{k=1}^s Q_k \psi_k, \quad (2.81)$$

donde  $\psi_k$  está definida por (2.27), por lo tanto la concentración promedio de nutriente en la  $i$ -ésima zona está dada por:

$$c_i = \int_0^T Q(t)g_i(z, t)dt = \int_0^T \sum_{k=1}^s Q_k \psi_k(t) \sum_{n=1}^{\infty} A_n^i(t) \cos(\lambda_n z) dt = \sum_{k=1}^s Q_k M_{k,i}, \quad (2.82)$$

donde

$$M_{k,i} = \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \int_0^T \psi_k(t) A_n^i(t) dt \quad (2.83)$$

Con esta definición de la razón de descarga, el funcional de masa toma la siguiente forma

$$m(Q) = \int_0^T Q(t)^2 dt = \int_0^T \left[ \sum_{k=1}^s Q_k \psi_k(t) \right]^2 dt = \sum_{k=1}^s Q_k^2 \int_0^T \psi_k^2(t) dt = \epsilon \sum_{k=1}^s Q_k^2. \quad (2.84)$$

Por lo tanto el problema de optimización (1.3)-(1.5), toma la siguiente forma:

$$\text{minimizar: } m(Q) = \sum_{n=1}^s \epsilon_n Q_n^2, \quad (2.85)$$

$$\text{sujeto a: } Q_i > 0, i = 1, 2, 3, \quad y \quad (2.86)$$

$$c_i = \sum_{k=1}^s M_{k,i} Q_k, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.87)$$

que en forma matricial, la ultima condición queda de la siguiente manera.

$$\begin{pmatrix} M_{1,1} & \cdots & M_{k,1} & \cdots & M_{s,1} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ M_{1,n} & \cdots & M_{k,n} & \cdots & M_{s,n} \\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{1,N} & \cdots & M_{k,N} & \cdots & M_{s,N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_1 \\ \vdots \\ Q_k \\ \vdots \\ Q_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}, \quad (2.88)$$

para obtener los  $Q_k$  que minimizan el funcional  $m(Q)$ , empleamos la función lsqin de Matlab.

Hay que notar que en este caso no es posible obtener una expresión para encontrar el sitio óptimo de descarga. Lo vamos a poder determinar al evaluar el funcional de masa como función del sitio de descarga  $m(z_0)$ , y el punto para el cual se minimize, será el sitio óptimo de descarga.

## 2.4. Solución numérica

A continuación mostramos la solución de los problemas formados por (2.1)-(2.4) y (2.57)-(2.60) empleando esquemas numéricos con el fin de comprobar las soluciones obtenidas



Después de la discretización en espacio, procedemos a discretizar en el tiempo sobre el intervalo  $[t_j, t_{j+1}]$  de tamaño  $\tau$ , y aplicando el esquema de Crank-Nicolson a (2.89), tenemos

$$\frac{\zeta^{j+1} - \zeta^j}{\tau} + A \left\{ \frac{\zeta^{j+1} + \zeta^j}{2} \right\} = f^j, \quad (2.94)$$

el cual se puede reescribir de la siguiente forma

$$\zeta^{j+1} = B\zeta^j + \tau S f^j, \quad \zeta^0 = 0, \quad (2.95)$$

donde

$$B = \left( I + \frac{\tau}{2} A \right)^{-1} \left( I + \frac{\tau}{2} A \right), \quad S = \left( I + \frac{\tau}{2} A \right)^{-1}. \quad (2.96)$$

siendo  $I$  la matriz identidad y  $A$  la matriz dada por (2.90).

Ahora solo falta dar las discretizaciones de los forzamientos  $f$ . Para el problema (2.1)-(2.4) el forzamiento  $f = Q\delta(z - z_0)$ , va estar formado por un vector de ceros excepto en la entrada correspondiente del punto  $z = z_i$  cuyo valor es igual a  $f_i = Q\delta(z - z_i) = Q/h$

$$f = Q\delta(z - z_0) = Q\delta(z - z_i) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ Q/h \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.97)$$

Por último, el forzamiento  $f$  del problema (2.57)-(2.60) dado por

$$p_i(z, t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau|\Omega|} & z \in \Omega_i = [\alpha_i, \beta_i] \text{ y } t \in (T - \tau, T) \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (2.98)$$

donde  $|\Omega_i| = |\beta_i - \alpha_i|$  es la longitud de  $\Omega_i$ , y  $\tau$  es el tiempo requerido para que el nutriente mantenga la concentración promedio crítica en una zona  $\Omega$ , va ha ser un vector de ceros excepto en las entradas que correspondan a los puntos  $z_i$  que esten en  $\Omega_i = [\alpha_i, \beta_i]$  cuyo valor es  $\frac{1}{\tau|\Omega|}$  y que además cumpla con  $t \in (T - \tau, T)$  ya que de no ser así las entradas del vector  $p$  serán ceros, es decir,

$$p_i(z, t) = \frac{1}{\tau|\Omega_i|} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad z \in \Omega_i \text{ y } t \in (T - \tau, T) \quad \text{ó} \quad p = 0 \quad \text{en otro caso} \quad (2.99)$$

Resolver el problema de difusión de nutrientes o el problema de la función anejo por este método no nos permitira resolver el problema de optimización ya que no es posible determinar la razón de descarga  $Q(t)$  y el sitio  $z_0$  de la fuente de nutrientes que minimizan la cantidad de masa total. Estas soluciones solo nos permitiran comprobar los perfiles de concentración  $\phi(z, t)$  y las soluciones adjuntas  $g_i(z, t)$  obtenidas con el método de Fourier.

## 2.5. Ejemplo 1

Consideremos una columna de agua unitaria la cual contiene una zona (figura 2.6a) ó dos zonas contaminadas (figura 2.6b), las zonas contaminadas son:  $\Omega_1 = [0.3, 0.4]$  y  $\Omega_2 = [0.8, 0.9]$ . Y se libera el nutriente desde el punto  $z_0 = 0.5$  a una razón de descarga constante  $Q = 0.5$ , considerando que el coeficiente de evaporación y el coeficiente de difusión son:  $\zeta = 0.3$   $\mu = 0.1$ . En la figura (2.7) se puede observar la concentración del nutriente liberado sobre la columna durante el lapso de tiempo  $t = [0, 8]$  (figura 2.7a), la concentración promedio alcanzada en las zonas contaminadas (figura 2.7b), considerando un tiempo de control  $\tau = 1$  y el perfil de nutrientes para el instante de tiempo  $t = 8$ .

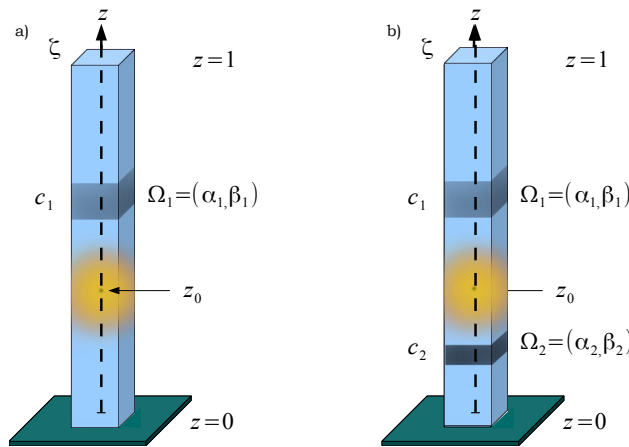


Figura 2.6: Biorremediación de una columna de agua con una o dos zonas contaminadas ( $\Omega_i = [\alpha_i, \beta_i]$ ,  $i = 1, 2$ ), considerando una fuente de nutrientes ubicada en  $z = z_0$

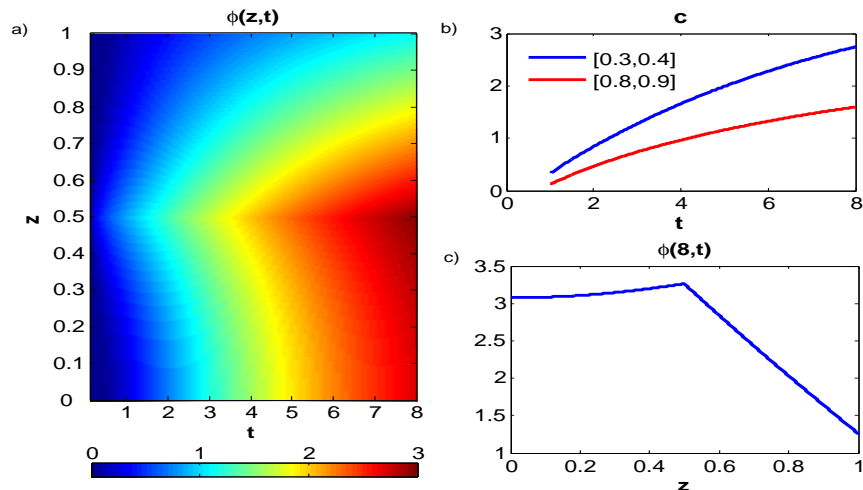


Figura 2.7: a) Cálculo de la concentración de nutriente  $\phi(z, t)$ , b) Concentración promedio  $c_i$  en las zonas  $\Omega_1 = [0.3, 0.4]$  y  $\Omega_2 = [0.8, 0.9]$  y c) perfil de concentración de nutriente para  $t=8$ , considerando  $\zeta=0.3$  y  $\mu=0.1$ .



Los parámetros de descarga  $Q = 0.5$  y  $z_0 = 0.5$  fueron tomados arbitrariamente. Se desea optimizar la masa total de nutriente liberado considerando que las concentraciones críticas  $c_i$  en las zonas  $\Omega_1 = [0.3, 0.4]$  y  $\Omega_2 = [0.8, 0.9]$  son las que se muestran en la tabla 2.1. De la figura 2.7b podemos observar que  $Q = 0.5$  y  $z_0 = 0.5$  no son precisamente los parámetros óptimos dado que las concentraciones promedio alcanzadas en cada zona son mucho mayores a las concentraciones de la tabla (2.1).

Caso	$\Omega_1$	$\Omega_2$
	$c_1$	$c_2$
1	2	-
2	-	2
3	0.5	0.5
4	0.9	0.5
5	2.1	0.94
6	2	0.5

Tabla 2.1: Concentraciones críticas.

Entonces de acuerdo a la estrategia desarrollada, cuando tenemos una zona contaminada (caso 1 y 2) el sitio óptimo de descarga es el punto que maximiza a  $F_1(z_0)$  la cual está dada por (2.20). Las funciones  $F_1(z_0)$  y  $F_2(z_0)$  de cada zona se muestran en la figura (2.8), en donde se puede observar que existe el sitio óptimo  $z_0^*$  y por lo tanto la razón de descarga óptima dada por (2.24). Los cuales resultaron estar dentro de las zonas contaminadas como era de esperar.

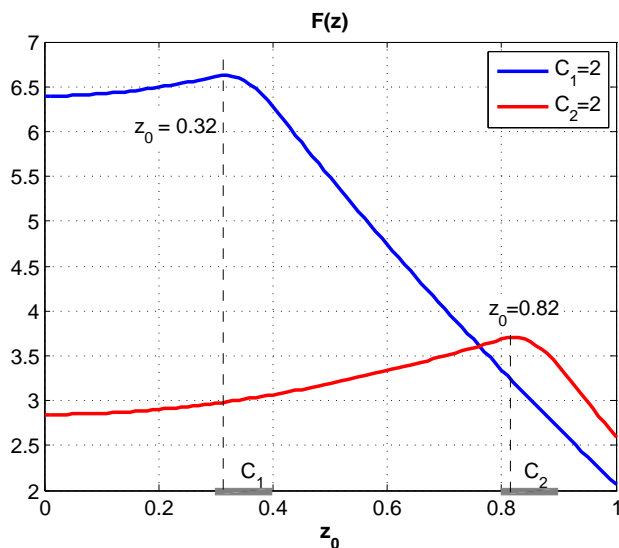


Figura 2.8: Sitio óptimo de descarga cuando se tiene una zona contaminada, considerando  $\zeta=0.3$  y  $\mu=0.1$ .

Para el caso en que tenemos dos zonas, el sitio óptimo de descarga es el punto en

donde la función  $G(z_0)$  dada por (2.79) se anula. En la figura (2.9) se muestran las gráficas de  $G(z_0)$  para los casos 3 y 4 (figura 2.9a) y los casos 5 y 6 (figura 2.9b). Donde podemos observar que para todos los casos excepto para el caso 6 (figura 2.9b-linea azul), fue posible determinar el sitio óptimo de descarga dado que existe un punto tal que  $G(z_0) = 0$ , condición de óptimización cuando se tienen dos zonas. En la tabla (2.5) se muestran los parámetros óptimos de descarga de los casos de la tabla 2.1.

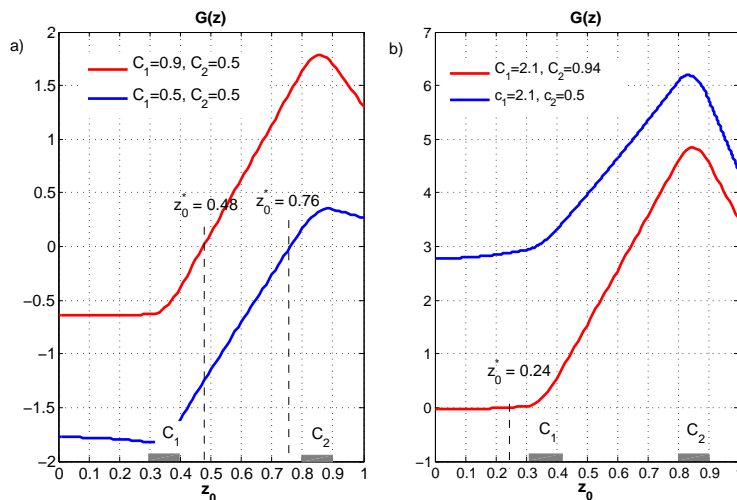


Figura 2.9: Sitio óptimo de descarga para dos zonas contaminadas.

Caso	$\Omega_1$	$\Omega_2$	Parámetros óptimos	
	$c_1$	$c_2$	$x_0^*$	$Q^*$
1	2	-	0.32	0.62
2	-	2	0.82	0.54
3	0.5	0.5	0.77	0.14
4	0.9	0.5	0.48	0.16
5	2.1	0.94	0.24	0.32
6	2	0.5	-	-

Tabla 2.2: Parámetros óptimos.

Desde el punto de vista de la teoría operador adjunto, para resolver el problema de optimización, es necesario conocer las funciones adjuntas asociadas a las zonas  $\Omega_1$  y  $\Omega_2$ , es decir,  $g_1(z_0, t)$  y  $g_2(z_0, t)$ , las cuales están dadas por (2.65) y (2.70). En la figura (2.10) podemos observar la variación de  $g_1(z, t)$  y  $g_2(z, t)$  en el intervalo de tiempo  $t = (0, 8)$ .

La forma de ver por que el punto  $z_0 = 0.5$ , no es el sitio óptimo para el caso 5 de la tabla 2.1, es por que las funciones adjuntas  $g_1(0.5, t)$  y  $g_2(0.5, t)$  las cuales podemos ver en la figura 2.10 (en líneas punteadas) o en la figura 2.11a podemos observar su perfil, no cumplen con la condición de tener la mayor área bajo la curva, lo cual si cumplen los perfiles de  $g_1(0.32, t)$  y  $g_2(0.82, t)$  mostrados en las figura 2.11b.

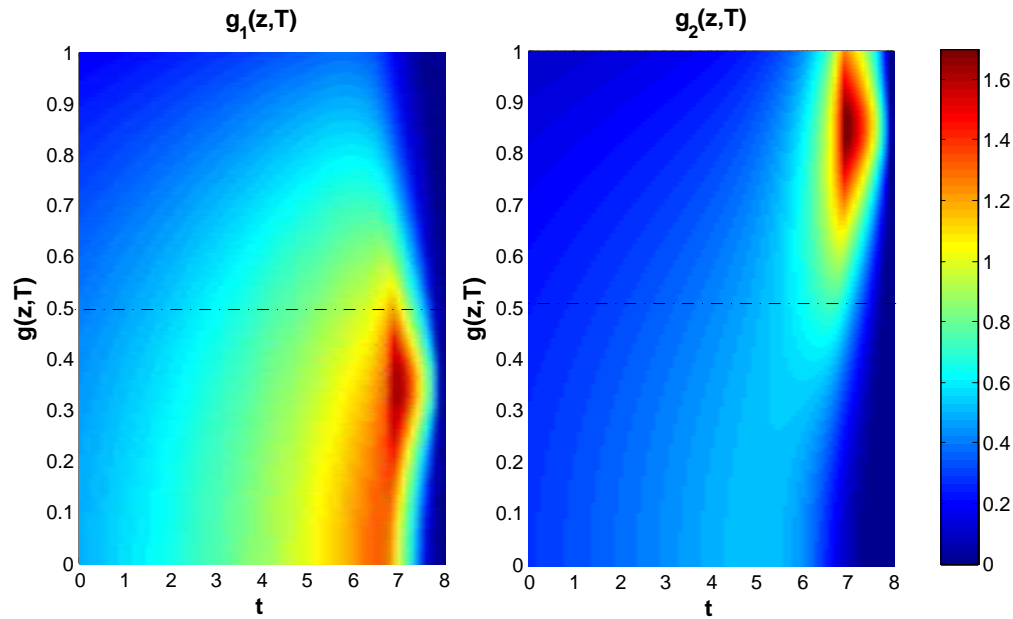


Figura 2.10: Variación de soluciones adjuntas  $g_1(z, t)$  y  $g_2(z, t)$ .

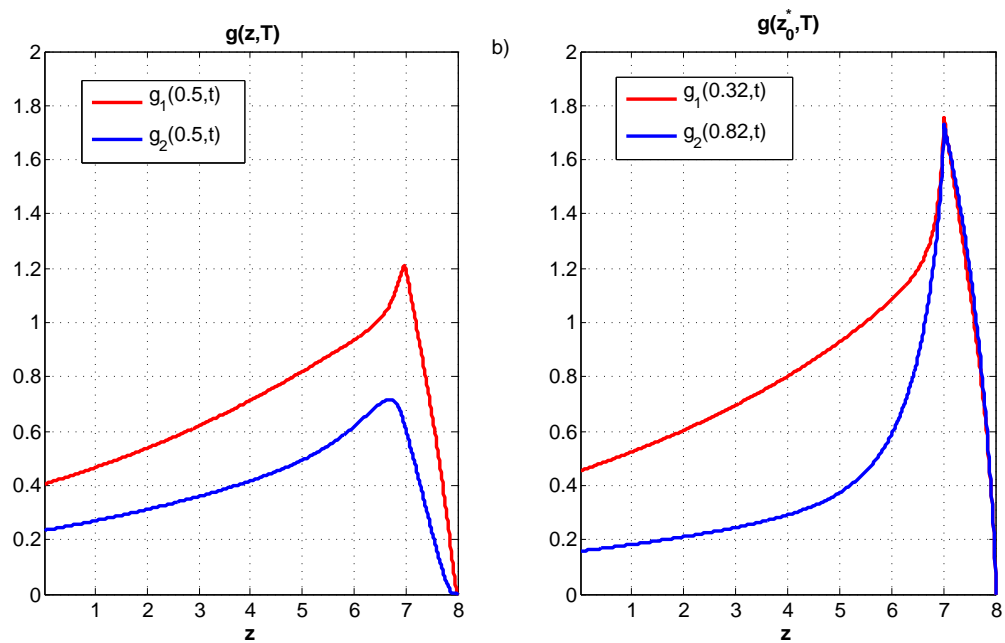


Figura 2.11: Funciones adjuntas en sitios óptimos  $g_1(z_0^*, t)$  y  $g_2(z_0^*, t)$ , para los casos 1 y 2.

Considerando el caso 5 pero ahora resolvemos el problema con una razón de descarga variable, con  $s = 8$  términos  $Q_k$  con  $\epsilon = 1$ , tenemos que resolver el problema dado por (2.36)-(2.38). En la figura 2.12, podemos observar la variación del funcional de masa  $m(Q)$  respecto al sitio de descarga  $z_0$  (figura 2.12a), de la cual podemos determinar el sitio óptimo de descarga dado que se puede observar fácilmente donde el funcional toma su valor mínimo. Además se muestra la variación de la concentración promedio en las zonas contaminadas

(figura 2.12b), dichas concentraciones críticas requeridas son logradas tal como se requiere para el caso 5 (tabla 2.1). Y finalmente se muestra la razón de descarga obtenida la cual tiene forma de función escalón, la cual es comparable con la razón de descarga obtenida para el caso en que la razón de descarga es constante, la cual resultado ser  $Q^* = 0.32$  (línea azul de la figura 2.12c) y de esta forma observamos que la definición de razón de descarga variable permite una mayor minimización de la masa total descargada ya que  $m(Q)/m(Q(t)) = 1.0858$ , es decir se disminuyó un 8.5% la masa total de nutriente suministrada.

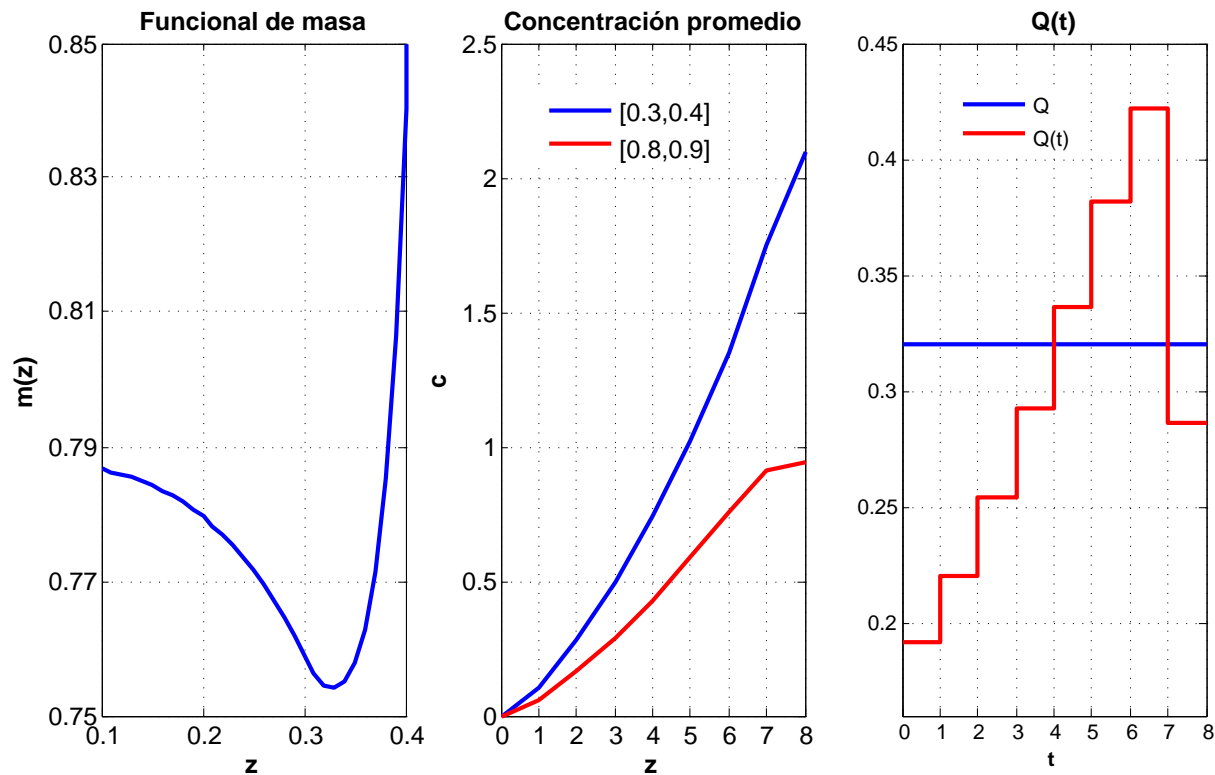


Figura 2.12: a) Funcional de masa  $m_{Q(t)}(z_0)$ , b) Concentración promedio en la zonas  $\Omega_i$   $i = 1, 2$  y c) Razón de descarga óptima, para el caso 5 de la tabla 2.1.

Al considerar que la razón de descarga fuera constante, para el caso 6 de la tabla 2.1 no fue posible determinar los parámetros, esta dificultad puede resolverse al considerar que la razón de descarga sea variable en el tiempo. En la figura 2.13 podemos observar el funcional de masa (figura 2.13a), la variación de la concentración promedio de nutriente en las zonas  $\Omega_i$  (figura 2.13b) y la razón de descarga óptima (figura 2.13c), mostrando de esta forma la solución a este caso.

Todos los resultados obtenidos en esta sección se verificaron con los dos métodos descritos (directo y adjunto) y las soluciones del problema directo y el problema adjunto se comprobaron empleando los métodos numéricos.

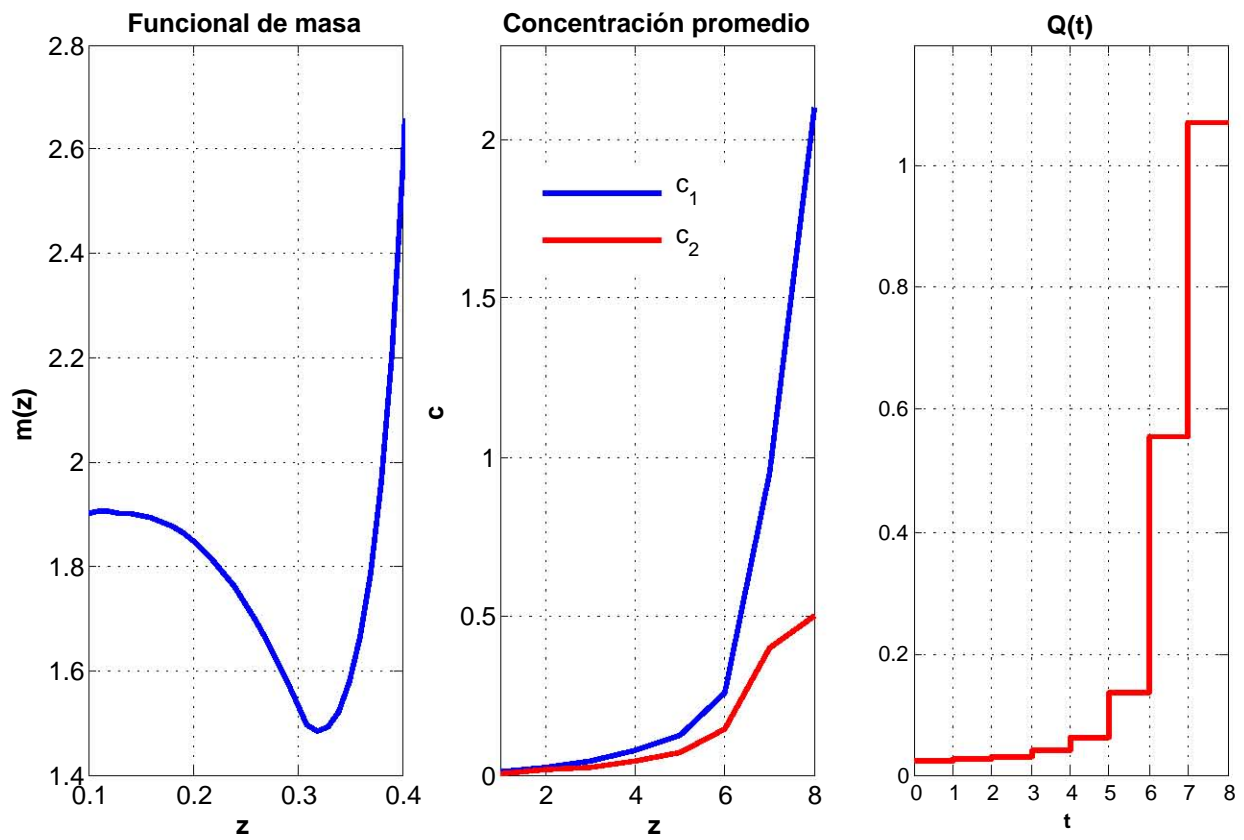


Figura 2.13: a) Funcional de masa  $m_{Q(t)}(z_0)$ , b) Concentración promedio en la zonas  $\Omega_i$   $i = 1, 2$  y c) Razón de descarga óptima, para el caso 6 de la tabla 2.1.

# Modelo de dispersión y su adjunto (3-D)

En este capítulo se da la teoría básica para resolver el problema de dispersión de nutrientes vertidos en un cuerpo de agua, con el fin de biorremediar ciertas zonas contaminadas con petróleo. Además se plantea y resuelve el problema adjunto asociado, el cual nos permitirá calcular los parámetros de descarga óptimos.

## 3.1. Modelo de dispersión

La concentración del nutriente  $\phi(x, t)$  en el dominio  $D \subset R^3$  (ver figura 3.1), y en el intervalo de tiempo  $[0, T]$ , se puede estimar con el siguiente modelo de dispersión

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi + \sigma \phi + \nabla \cdot \vec{\phi}_s = Q(t)\delta(r - r_0) \quad (3.1)$$

junto con las siguientes condiciones iniciales y de frontera

$$\vec{\phi}_s = -\nu_s \phi \vec{k} \quad \text{en } D, \quad (3.2)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} - \zeta \phi \vec{k} \cdot \vec{n} \quad \text{sobre } S_T, \quad (3.3)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{sobre } S^+, \quad (3.4)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} - U_n \phi = 0 \quad \text{sobre } S^-, \quad (3.5)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} \quad \text{sobre } S_B, \quad (3.6)$$

$$\phi(r, 0) = \phi^0(r) \quad \text{en } D, \quad (3.7)$$

$$\nabla \cdot \vec{U} = 0 \quad \text{en } D. \quad (3.8)$$

Donde (3.1) representa la ecuación de advección-difusión,  $\mathbf{U}(r, t)$  es el campo de velocidad que satisface la condición de incompresibilidad (3.8),  $\mu(r, t)$  es el coeficiente de difusión

turbulenta,  $\sigma(r, t)$  es el coeficiente de transformación química que representa la razón de decaimiento del nutriente en el agua. El término lineal de primer orden  $\sigma\phi(r, t)$ , describe el proceso de transformación química, el cual es una aproximación razonable para los nutrientes en agua como el nitrógeno y fósforo. El término  $\nabla \cdot \vec{\phi}_s$  en (3.1), donde  $\vec{\phi}_s$  esta dado por (3.2), describe el cambio de concentración de nutriente por unidad de tiempo debido a la sedimentación con velocidad constante  $\nu_s > 0$ , y  $\delta(r - r_0)$  es la delta de Dirac centrada en el punto de descarga  $r_0$  de nutriente.

La ecuación (3.3) es la condición de frontera sobre la superficie libre  $S_T$  del dominio  $D$ , donde  $\zeta(r, t)$  es el coeficiente que caracteriza el proceso de evaporación del nutriente sobre la superficie libre.

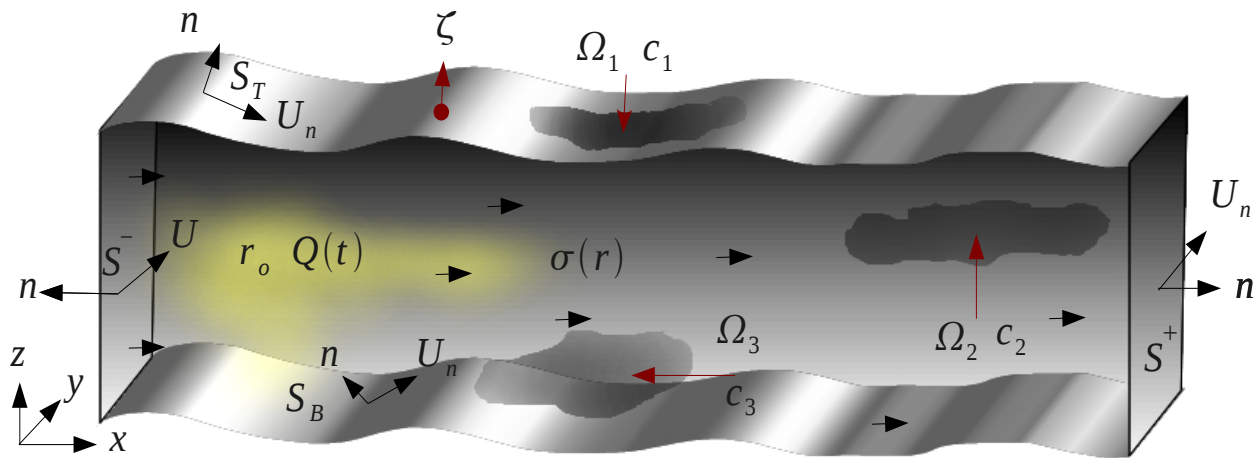


Figura 3.1: Dominio de estudio  $D$ .

La condición de frontera dada por (3.6) representa la condición de frontera en el fondo  $S_B$  del dominio  $D$ . Las ecuaciones (3.4) y (3.5) son las correspondientes condiciones de frontera sobre los límites laterales de  $D$ , donde  $S^+$  es la frontera donde se tiene un flujo de salida y se cumple que  $U_n = \vec{U} \cdot \vec{n} \geq 0$ , y  $S^-$  es la frontera de entrada de flujo donde  $U_n < 0$ . Finalmente, la ecuación (3.7) representa la distribución inicial del nutriente al tiempo  $t = 0$ . En todas las ecuaciones,  $\vec{n}$ , es el vector unitario normal (dirigido hacia el exterior) a la frontera  $\partial D = S_T \cup S^+ \cup S^- \cup S_B$  y  $\vec{k}$  es el vector unitario dirigido hacia arriba en el sistema de coordenadas cartesianas (Fig. 3.2).

Sobre las fronteras notemos que

$$\vec{k} \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{sobre } S^+ \cup S^- \quad \text{y} \quad \vec{U} \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{en } S_T \cup S_B. \quad (3.9)$$

Además, las condiciones de frontera (3.3) y (3.4) son generales, es decir, no son solo para superficies horizontales en la superficie libre  $S_T$  y en el fondo  $S_B$ , por lo tanto, el modelo de dispersión puede tomar en cuenta el movimiento ondulatorio sobre la superficie y la topografía marina.

### 3.1.1. Ecuación de balance de masa

A continuación mostraremos que la solución del modelo de dispersión (3.1)-(3.8) satisface la ecuación de balance de masa. En efecto integrando la ecuación (3.1) sobre el dominio  $D$ , obtenemos

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

Aplicando el teorema de la divergencia (Kreyszing, 2006), es posible reescribir algunas integrales de la ecuación anterior, de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \int_D \vec{U} \cdot \nabla \phi dr &= \int_D \nabla \cdot (\vec{U} \phi) dr = \int_{\partial D} \vec{U} \cdot \vec{n} \phi dS, \\ \int_D \nabla \cdot \mu \nabla \phi dr &= \int_{\partial D} \mu \nabla \phi \cdot \vec{n} dS = \int_{\partial D} \mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} dS, \\ \int_D \nabla \cdot \vec{\phi}_s dr &= \int_{\partial D} \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} dS. \end{aligned}$$

Finalmente, dividiendo cada integral sobre la frontera  $\partial D$  en cuatro integrales sobre  $S_T$ ,  $S^+$ ,  $S^-$  y  $S_B$ , y aplicando las ecuaciones (3.3)-(3.6) y la observación (3.9), obtenemos la ecuación de balance de masa

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi dr = Q(t) - \int_D \sigma \phi dr - \int_{S^+} U_n \phi dS - \int_{S_T} \zeta \phi \vec{k} \cdot \vec{n} dS. \quad (3.10)$$

Es decir, la masa total del nutriente se incrementa por la razón de descarga  $Q(t)$ , y decrece por las transformaciones químicas, el flujo advectivo sobre  $S^+$  y la evaporación superficial. Es importante notar que el proceso de sedimentación no produce flujo sobre la frontera  $\partial D$ , de esta manera, estos procesos ocurren estrictamente dentro de la región  $D$ .

### 3.1.2. Existencia, unicidad y estabilidad de la solución del modelo de dispersión

Ahora mostraremos que el problema de dispersión (3.1)-(3.8) está bien planteado de acuerdo a las condiciones sugeridas por Jacques Hadamard, es decir, se cumplen las condiciones de existencia, unicidad y estabilidad de la solución.

En efecto, de la ecuación (3.1), el operador del modelo de dispersión es

$$A\phi = \vec{U} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi + \sigma \phi + \nabla \cdot \vec{\phi}_s. \quad (3.11)$$



Además definimos el producto interno en el espacio de Hilbert  $L_2(D)$  como

$$(A\phi, \phi) = \int_D \phi A\phi dr.$$

y al calcularlo obtenemos la siguiente expresión

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

El teorema de la divergencia nos permite modificar algunas integrales en la última ecuación, de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \int_D \phi \vec{U} \cdot \nabla \phi dr &= \frac{1}{2} \int_{\partial D} \phi^2 \vec{U} \cdot \vec{n} dS, \\ \int_D \phi \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) dr &= \int_{\partial D} \phi \mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} dS - \int_D |\nabla \phi|^2 dr, \\ \int_D \phi \nabla \cdot \vec{\phi}_s dr &= \frac{1}{2} \int_{\partial D} \phi \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} dS. \end{aligned}$$

Finalmente, dividiendo cada integral sobre la frontera  $\partial D$  en cuatro integrales sobre  $S_T$ ,  $S^+$ ,  $S^-$  y  $S_B$ , y aplicando las condiciones (3.3)-(3.6) y (3.9), obtenemos

$$\begin{aligned} (A\phi, \phi) &= \int_D \sigma \phi^2 dr + \int_D \mu |\nabla \phi|^2 dr + \\ &+ \frac{1}{2} \left\{ \int_{S^+} U_n \phi^2 dS - \int_{S^-} U_n \phi^2 dS + \int_{S_T} \nu_s \phi^2 \vec{k} \cdot \vec{n} dS \right\} + \\ &+ \int_{S_T} \zeta \phi^2 \vec{k} \cdot \vec{n} dS. \quad (3.12) \end{aligned}$$

Donde  $U_n < 0$  en  $S^-$  y  $\vec{k} \cdot \vec{n} > 0$  en  $S_T$ , por lo tanto la ecuación anterior (3.12) muestra que el operador es positivo semidefinido:  $(A\phi, \phi) \geq 0$ .

Tomando el producto interno de cada término de la ecuación (3.1) con  $\phi$ , obtenemos

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

Usando la condición  $(A\phi, \phi) \geq 0$  y la desigualdad de Schwarz, la última ecuación implica la siguiente desigualdad:

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

La expresión anterior la podemos reescribir de la siguiente forma

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

por lo tanto tenemos

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

y de esta manera

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

Integrando la expresión anterior sobre el intervalo de tiempo  $(0, T)$ , obtenemos

$$\|\phi(x, t)\| \leq T \max_{0 \leq t \leq T} \|Q(t)\delta(r - r_0)\| + \|\phi^0(r)\|. \quad (3.13)$$

Ya que el modelo de dispersión (3.1)-(3.8) es lineal con respecto a  $\phi(x, t)$ , entonces (3.13) garantiza que la solución del problema (3.1)-(3.8) es única y continua respecto a perturbaciones en la condición inicial y el forzamiento.

Usando el método descrito en Skiba y Parra-Guevara (1999, 2000) es posible probar la existencia de una solución general al problema (3.1)-(3.8), lo cual implica que el modelo de dispersión esta bien planteado en el sentido de Hadamard. Además, podemos notar que el hecho de que el operador  $A$  sea positivo semidefinido nos permite separarlo en las direcciones coordenadas, y con la ayuda de los esquemas numéricos de Marchuk (1986) y Crank-Nicolson (1947) podemos construir un algoritmo incondicionalmente estable, balanceado y de segundo orden para calcular la solución aproximada del problema (3.1)-(3.8) (Skiba,1993).

## 3.2. Modelo adjunto

El problema variacional (1.3) es difícil de analizar por que las restricciones  $J_i(\phi) = c_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ), están relacionadas implícitamente con la solución  $Q(t)$  del problema de optimización a través de la solución  $\phi(r, t)$  del modelo de dispersión (3.1)-(3.8). Para establecer una dependencia explícita entre las restricciones del problema  $c_i$  y la razón de descarga  $Q(t)$ , planteamos el modelo adjunto del modelo de dispersión (3.1)-(3.8).

Para obtener el operador adjunto  $A^*$  del operador  $A$  del modelo de dispersión, partimos de la identidad de Lagrange, la cual esta dada por:

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

donde  $(\cdot, \cdot)$  es el producto interno en  $L_2(D)$  y  $g$  es la función adjunta asociada a  $\phi$  (Marchuk,1996; Skiba et al., 2005).

Calculando  $(A\phi, g)$ , obtenemos

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

Aplicando una vez más el teorema de la divergencia, podemos reescribir algunas integrales en la última ecuación, de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \int_D g \vec{U} \cdot \nabla \phi dr &= \int_{\partial D} g \phi \vec{U} \cdot \vec{n} dS - \int_D \phi \vec{U} \cdot \nabla g dr \\ \int_D g \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) dr &= \int_{\partial D} g \mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} dS - \int_{\partial D} \phi \mu \frac{\partial g}{\partial \vec{n}} dS + \int_D \phi \nabla \cdot \mu \nabla g dr \\ \int_D g \nabla \cdot \vec{\phi}_s dr &= \int_{\partial D} g \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} dS - \int_D \phi \nabla \cdot \vec{g}_s dr \end{aligned}$$

donde  $\vec{g}_s = -\nu_s g \vec{k}$ .

Sustituyendo las expresiones anteriores, se tiene

$$\begin{aligned} (A\phi, g) &= \int_D \phi \left( -\vec{U} \cdot \nabla g - \nabla \cdot \mu \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot \vec{g}_s \right) dr + \\ &\quad + \int_{\partial D} g \phi \vec{U} \cdot \vec{n} dS + \int_{\partial D} \phi \mu \frac{\partial g}{\partial \vec{n}} dS - \int_{\partial D} g \mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} dS - \int_D g \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} dS. \end{aligned}$$

Dividiendo las integrales sobre la frontera  $\partial D$ , entre las fronteras  $S_T$ ,  $S^+$ ,  $S^-$ , y  $S_B$ , y utilizando las condiciones (3.3)-(3.6) y (3.9), obtenemos

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

suponiendo que la función  $g$  satisface las condiciones de frontera (3.17)-(3.20).

Además tenemos que  $(A\phi, g) = (\phi, A^*g)$ , por lo tanto,

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

lo cual implica que  $A^*g$ , esta dada por

$$A^*g = -\vec{U} \cdot \nabla g - \nabla \cdot \mu \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot \vec{g}_s.$$

Por otra parte, multiplicando (3.1) por  $g$  y tomando las integrales sobre el dominio del espacio y tiempo  $D \times (0, T)$ , obtenemos

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

Integrando por partes la primera integral, y usando la condición (3.7) y  $g(r, T) = 0$ , resulta

$$\int_0^T \int_D g \frac{\partial \phi}{\partial t} dr dt = - \int_D g(r, 0) \phi^0(r) dr - \int_0^T \int_D \phi \frac{\partial g}{\partial t} dr dt$$

Aplicando ahora la ecuación (3.1), la identidad de Lagrange y la delta de Dirac, uno puede obtener

$$\int_0^T \int_D \phi \left\{ -\frac{\partial g}{\partial t} + A^*g \right\} dr dt = \int_0^T Q(t)g(r_0, t)dt - \int_D g(r, 0)\phi^0(r)dr. \quad (3.14)$$

De (3.14) podemos observar que existe una relación explícita entre la razón de descarga del nutriente  $Q(t)$ , con la concentración de nutriente  $\phi(r, t)$  por medio de la función  $g$ .

Para determinar la función  $g$ , consideramos el siguiente modelo de dispersión adjunto,

$$-\frac{\partial g}{\partial t} - \vec{U} \cdot \nabla g - \nabla \cdot \mu \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot \vec{g}_s = p(r, t) \quad (3.15)$$

con las siguientes condiciones de frontera y condición inicial,

$$\vec{g}_s = -\nu_s g \vec{k} \quad \text{en } D \quad (3.16)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial \vec{n}} + \zeta g \vec{k} \cdot \vec{n} \quad \text{sobre } S_T \quad (3.17)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial \vec{n}} + U_n g = 0 \quad \text{sobre } S^+, \quad (3.18)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{sobre } S^-, \quad (3.19)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{sobre } S_B, \quad (3.20)$$

$$g(r, T) = 0 \quad \text{en } D, \quad (3.21)$$

Notemos que las condiciones de frontera (3.16)-(3.20) y la condición inicial (3.21) para la solución  $g$  se pensaron de tal forma que se cumpla la identidad de Lagrange. Además, el forzamiento  $p(r, t)$  de la ecuación (3.15), se definirá de tal manera que se establezca una relación explícita de la concentración media del nutriente  $J_i(\phi)$  en una zona contaminada  $\Omega_i \in D$  con la razón de descarga  $Q(t)$  y la concentración inicial de nutriente  $\phi^0(r)$ , por medio de la solución adjunta  $g$ .

El forzamiento  $p(r, t)$  lo definimos de la siguiente forma

$$p(r, t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau|\Omega|} & r \in \Omega \text{ y } t \in (T - \tau, T) \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (3.22)$$

donde  $|\Omega|$  es el volumen de  $\Omega$ , y  $\tau$  es el tiempo requerido para que el nutriente mantenga la concentración promedio crítica en una zona.

La ecuación (3.15) la podemos escribir de la siguiente forma

$$-\frac{\partial g_i}{\partial t} + A^* g_i = p(r, t)$$

para la  $i$ -ésima solución adjunta  $g_i$ , por lo tanto, el término de la izquierda de (3.14) queda de la siguiente forma

$$\int_0^T \int_D \phi \left\{ -\frac{\partial g_i}{\partial t} + A^* g_i \right\} dr dt = \int_0^T \int_D \phi p(r, t) dr dt = \int_0^T \int_D \phi \frac{1}{\tau |\Omega|} dr dt = J_i(\phi).$$

y el término de la derecha de (3.14) se reduce a

$$\int_0^T Q(t) g(r_0, t) dt - \int_D g(r, 0) \phi^0(r) dr = \int_0^T g_i(r_0, t) Q(t) dt + \int_D g_i(r, 0) \phi^0(r) dr,$$

de esta forma obtenemos

$$J_i(\phi) = \int_0^T g_i(r_0, t) Q(t) dt + \int_D g_i(r, 0) \phi^0(r) dr, \quad (3.23)$$

a esta última relación se le conoce como principio de dualidad.

En nuestro caso  $\phi^0 = 0$ , y la última ecuación se reduce a

$$J_i(\phi) = \int_0^T g_i(r_0, t) Q(t) dt. \quad (3.24)$$

Utilizando esta fórmula integral en (1.5) para cada zona  $\Omega_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ), obtenemos una formulación modificada del problema variacional (1.3)-(1.5), el cual es más conveniente para el análisis

$$\text{minimizar: } m(Q) = \int_0^T Q^2(t) dt, \quad (3.25)$$

$$\text{sujeto a: } Q(t) > 0, 0 < t < T, \quad \text{y}, \quad (3.26)$$

$$\int_0^T g_i(r_0, t) Q(t) dt = c_i. \quad (3.27)$$

En la nueva formulación variacional es importante notar a partir de (3.27) las soluciones adjuntas  $g_i(r_0, t)$  son independientes de la razón de descarga  $Q(t)$ . Las cuales están determinadas por la dinámica del flujo en la región  $D$  y pueden considerarse como funciones de peso que caracterizan el impacto de la descarga del nutriente en el punto  $r_0$ , sobre cada zona  $\Omega_i$ . Por lo tanto, las soluciones adjuntas son consideradas como funciones de información o de influencia en el problema de control.

Además de las aplicaciones en los problemas de control, las soluciones del problema adjunto son ampliamente utilizadas para estudiar la sensibilidad de varios modelos, y en particular, en los modelos de pronóstico del tiempo y teoría del clima, modelos de la atmósfera y del océano, en los problemas de asimilación de datos, en los problemas de identificación de fuentes contaminantes desconocidas (como en los accidentes nucleares), y en los problemas de control de emisiones de plantas industriales (Marchuk 1986, Parra-Guevara y Skiba, 2003, 2006; Skiba y Davidova-Belitskaya, 2003, Skiba et. al., 2005)

### 3.2.1. Peculiaridades de las estimaciones duales y la sensibilidad de las fórmulas

Ahora discutiremos las principales características de las estimaciones duales (1.5) y (3.23) o sus simplificaciones (3.24) y mostraremos la utilidad de las estimaciones del adjunto en el estudio de sensibilidad de la concentración promedio  $J(\phi)$ , ante variaciones en la distribución inicial  $\phi^0(r)$  de nutriente, razón de descarga  $Q(t)$  y posición  $r_0$  de la fuente.

En el monitoreo ambiental, las estimaciones adjuntas (3.23) son útiles para complementar las estimaciones directas (1.5). Uno puede usar tanto estimaciones directas como estimaciones adjuntas dependiendo de la situación. Asumimos, por ejemplo, que la concentración promedio  $J_i(\phi)$  de nutriente es monitoreada en  $N$  zonas ecológicas importantes  $\Omega_i$  del dominio  $D$  ( $i = 1, \dots, N$ ). Si el número de zonas son lo suficientemente grandes, entonces es mejor resolver el problema (3.1)-(3.8) y usar las estimaciones directas (1.5) en cada zona. Por otro lado, si el número  $N$  es lo suficientemente pequeño entonces es más efectivo y económico resolver el problema adjunto (3.15)-(3.21) y usar las estimaciones adjuntas (3.24). A diferencia de (1.5), la estimación adjunta (3.24), permite evaluar explícitamente la contribución de cada fuente sobre cada valor  $J_i(\phi)$ .

En el caso de que la razón de descarga sea invariable con el tiempo ( $Q(t) = Q$ ), la evaluación (3.24) es aun más simple, es decir

$$J_i(\phi) = \int_0^T g_i(r_0, t)Q(t)dt = \int_0^T g_i(r_0, t)Qdt = w_iQ \quad (3.28)$$

donde

$$w_i = \int_0^T g_i(r_0, t)dt \geq 0. \quad (3.29)$$

Cada función de peso  $w_i$ , depende solo de la solución adjunta y caracteriza la contribución de la fuente de emisión con una razón de descarga  $Q$  a la concentración media  $J_i(\phi)$  en  $\Omega_i$ .

De acuerdo a lo anterior, podemos decir que la estimación directa (1.5) relativa a la solución  $\phi(r, t)$  del problema (3.1)-(3.8), es independiente de una zona en concreto  $\Omega$ , sin embargo, depende de la razón de descarga  $Q(t)$ , posición  $r_0$  de la fuente y de la distribución inicial del nutriente  $\phi^0(r)$  en  $D$ . Esta es la razón por la cual la estimación (1.5) es preferible si uno necesita conocer la distribución de nutriente en muchas zonas  $\Omega_i$  en el dominio  $D$  o en cada punto de  $D \times (0, T)$ . Sin embargo, las estimaciones directas requieren resolver el problema (3.1)-(3.8) cada vez que los parámetros  $Q(t)$ ,  $r^0$  o  $\phi^0(r)$  cambien. En el estudio de la sensibilidad del modelo, esta aproximación requiere mucho tiempo computacional, porque  $J(\phi)$  debe ser calculada siempre que nuevos valores de estos parámetros sean usados.

A diferencia de esto, las soluciones  $g_i(r, t)$  del problema adjunto dependen de la zona  $\Omega_i$ , pero son independientes de  $Q(t)$ ,  $r_0$  o  $\phi^0(r)$ . En la evaluación adjunta (3.23),  $g_i(r, t)$  sirve como una función de peso que caracteriza la respuesta del modelo a estos tres parámetros.

Dado que el problema adjunto es lineal, de (3.23) podemos calcular la variación de la concentración  $\delta J_i(\phi)$ , lo cual implica

$$\delta J_i = \int_0^T g_i(r_0, t) \delta Q(t) dt + \int_D g_i(r, 0) \delta \phi^0(r) dr. \quad (3.30)$$

Esta relación de sensibilidad es muy importante por que relaciona la variación  $\delta J_i(\phi)$  en  $\Omega_i$  ante variaciones de  $\delta Q(t)$  y  $\delta \phi^0(r)$  dada una razón de descarga  $Q(t)$  y distribución inicial de nutriente  $\phi^0(r)$ . Esto hace que las estimaciones (3.24) y (3.30) sean más eficientes y computacionalmente económicas, por que una vez calculada la solución  $g_i(r, t)$ , puede usarse repetidamente en estas fórmulas para valores diferentes de  $Q(t)$ ,  $r_0$  o  $\phi_0(r)$ .

El efecto de cambiar la posición de la fuente de  $r_0$  a  $r'_0$  se estima por la siguiente formula

$$\delta J_i(\phi) = \int_0^T [g_i(r'_0, t) - g_i(r_0, t)] Q(t) dt. \quad (3.31)$$

Finalmente, damos sin demostración la fórmula general de sensibilidad

$$\begin{aligned} \delta J_i(\phi) = & \int_0^T g_i(r_0, t) \delta Q(t) dt + \int_D g_i(r, 0) \delta \phi^0(r) dr - \\ & - \int_0^T \int_{S_T} g_i(r, t) \phi(r, t) \delta \zeta(r, t) dS dt - \int_0^T \int_D g_i(r, t) B(r, t) dr dt, \end{aligned} \quad (3.32)$$

donde

$$B(r, t) = \delta \vec{U} \cdot \nabla \phi + \delta \sigma \phi - \nabla \cdot \delta \mu \nabla \phi + \delta \nu_s \frac{\partial \phi}{\partial z}$$

(Skiba y Parra-Guevara (2000), la cual toma en cuenta las variaciones arbitrarias  $\delta Q(t)$  y  $\delta \phi^0(r)$  y variaciones pequeñas de  $\delta \vec{U}$ ,  $\delta \sigma$ ,  $\delta \mu$ ,  $\delta \nu_s$  y  $\delta \zeta$  en el dominio  $D$ . A diferencia de las formulas previas, estimar (3.32) es mucho más complicado por que utiliza las soluciones de ambos problemas (3.1)-(3.8) y (3.15)-(3.21) y las ecuaciones lineales para las perturbaciones.

# Resultados Analíticos

---

En este capítulo se dan los argumentos teóricos que sustentan la existencia y unicidad del sitio óptimo de descarga y la razón de descarga óptima del problema variacional (3.25)-(3.27), elementos esenciales para la estrategia de biorremediación propuesta en el presente trabajo.

## 4.1. Propiedades del espacio de factibilidad y el funcional de masa

Para analizar la existencia y unicidad de la solución del problema variacional (3.25)-(3.27), ahora mostramos algunas propiedades del espacio de factibilidad y el funcional  $m(Q)$  cuando el punto de descarga  $r_0$  está fijo (Parra-Guevara y Skiba, 2007; Parra-Guevara, Skiba y F. N. Arellano, 2011).

**Lema 1.** El conjunto de factibilidad definido por

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

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

**Demostración.** En efecto, sean  $Q_1$  y  $Q_2$  dos elementos del espacio de factibilidad, es decir,  $Q_1$  y  $Q_2 \in \Theta$  y  $\lambda \in (0, 1)$ . Entonces, se tiene,

$$\lambda Q_1 + (1 - \lambda)Q_2 \geq 0, \quad 0 \leq t \leq T.$$

Multiplicando la expresión anterior por  $g_i(r_0, t)$  e integrando en el intervalo  $[0, T]$ , obtenemos

$$\int_0^T [\lambda Q_1 + (1 - \lambda)Q_2] g_i(r_0, t)dt = \int_0^T \lambda Q_1 g_i(r_0, t)dt + \int_0^T (1 - \lambda)Q_2 g_i(r_0, t)dt,$$



y utilizando la expresión (3.27), dada por

$$\int_0^T g_i(r_0, t)Q(t)dt = c_i,$$

obtenemos

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

y por consiguiente,  $\Theta$  es un conjunto convexo.

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

**Demostración.** Para mostrar esto tenemos que probar que  $\Theta = \bar{\Theta}$ . Sea  $Q_0$  un elemento de  $\bar{\Theta}$ . Entonces hay una sucesión  $\{Q_k\}_{k=1}^{\infty}$  en  $\Theta$  tal que

$$\|Q_k - Q_0\| \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad k \rightarrow \infty.$$

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

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

Esta última desigualdad contradice la convergencia de  $\{Q_k\}_{k=1}^{\infty}$  en  $L_2(0, T)$ , por lo que,  $Q_0$  es una función no negativa en  $(0, T)$ .

De la desigualdad de Schwarz tenemos

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

y en el caso límite  $k \rightarrow \infty$ , obtenemos

$$\int_0^T Q_0 g_i(r_0, t) dt = c_i, \quad (i = 1, \dots, N),$$

es decir,  $Q_0 \in \Theta$ .

**Lema 3.** El funcional  $m(Q)$  del problema (3.25)-(3.27), es estrictamente convexo en el espacio de factibilidad  $\Theta$ .

**Demostración.** Consideramos,  $Q_1, Q_2 \in \Theta$  tales que  $Q_1 \neq Q_2$  y  $\lambda \in (0, 1)$  y calculando el funcional  $m[\lambda Q_1 + (1 - \lambda)Q_2]$ , tenemos

además  $\lambda^2 < \lambda$ , entonces

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

y de esta forma obtenemos

reescribiendo el término de la derecha, obtenemos

$$\begin{aligned} \int_0^T Q_2^2 dt + 2\lambda \int_0^T Q_2(Q_1 - Q_2) dt + \lambda \int_0^T (Q_1 - Q_2)^2 dt &= \lambda \int_0^T Q_1^2 dt + (1 - \lambda) \int_0^T Q_2^2 dt \\ &= \lambda m(Q_1) + (1 - \lambda)m(Q_2), \end{aligned}$$

lo cual implica que

$$m[\lambda Q_1 + (1 - \lambda)Q_2] < \lambda m(Q_1) + (1 - \lambda)m(Q_2)$$

y por lo tanto el funcional  $m(Q)$  es estrictamente convexo.

**Lema 4.** Un conjunto cerrado, no vacío y convexo, es un espacio uniformemente convexo de Banach, que posee un único punto cercano a un punto dado.

La prueba del Lema 4 puede verse en Cheney(1966).

Debe notarse que los Lemas 1-3 se han probado bajo la condición de que  $\Theta$  es un conjunto no vacío. Esta es una propiedad no trivial del espacio de factibilidad (4.1). Una condición necesaria para que cumpla esta condición es que para cada  $i$ ,  $g_i(r_0, t) > 0$  en un intervalo abierto  $I_i \in (0, T)$ ,  $1 < i < N$ . Esto significa que el punto de descarga  $r_0$  no debe tomarse de manera arbitraria. En efecto, debe de seleccionarse tal que durante el intervalo  $(0, T)$ , el nutriente sea capaz de llegar a cada zona contaminada  $\Omega_i$ . Además, esta condición no es suficiente (excepto para el caso  $N = 1$ ). Por ejemplo, si

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

y  $c_j \neq c_k$ , entonces el espacio  $\Theta$  es vacío y el problema variacional (3.25)-(3.27) no tiene solución. Este conjunto también es vacío cuando dos zonas distintas  $\Omega_i$  y  $\Omega_j$ , con  $c_i \neq c_j$ , poseen una dinámica y geometría tal que

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

Por lo tanto, para escoger el punto de descarga  $r_0$  cuando las concentraciones críticas para dos zonas son diferentes, se debe evitar una simetría entre las zonas contaminadas y el punto de descarga.

Ahora provemos la existencia y unicidad de la solución del problema (3.25)-(3.27).

**Teorema 1.** Si el espacio de factibilidad  $\Theta$  es no vacío, entonces el problema variacional (3.48)-(3.50) tiene solución única.

el cual se obtiene sustituyendo (4.3) en la integral de las restricciones (3.27) del problema variacional.

Ahora mostremos con el siguiente teorema que (4.3) y (4.4) son condiciones suficientes para tener un mínimo.

**Teorema 2.** Si  $Q^*(t)$ , dada por (4.3) y (4.4), es una función no negativa en  $(0, T)$ , entonces, es la razón de descarga óptima.

Sea  $Q_0 = Q^* + \delta Q$  una razón de descarga factible ( $Q_0 \in \Theta$ ), entonces

$$\int_0^T \delta Q g_i(r_o, t) dt = 0, \quad (i = 1, \dots, N) \quad (4.5)$$

donde  $\delta Q \neq 0$  es una variación arbitraria de  $Q^*$ .

Y para mostrar que  $(Q^*)$  es el óptimo, calculemos la diferencia entre los funcionales  $m(Q_0)$  y  $m(Q^*)$ , entonces

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

sustituyendo (4.3) y por (4.5) obtenemos

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

lo cual implica que

$$m(Q_0) > m(Q^*)$$

y de esta forma mostramos que  $Q^*$  es la razón de descarga óptima o mínima del problema (3.25)-(3.27).

Los multiplicadores de Lagrange  $\alpha_i$  los podemos obtener utilizando la regla de Cramer, la cual se aplica para obtener la solución de un sistema de ecuaciones de la forma  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ , donde  $A$  es la matriz de coeficientes del sistema,  $\mathbf{x}$  es el vector columna de las incógnitas y  $\mathbf{b}$  el vector columna de los términos independientes, entonces la solución del sistema está dado por:

$$x_j = \frac{\det(A_j)}{\det(A)}$$

donde  $A_j$  es la matriz resultante de reemplazar la  $j$ -ésima columna de  $A$  por el vector columna  $\mathbf{b}$ . Además debe notarse que el sistema tiene solución cuando el determinante de la matriz  $A$  es no nulo.

Por lo tanto los multiplicadores de Lagrange del sistema (4.4) están dados por

$$\alpha_j = \frac{\det(\Psi_j)}{\det(\Psi)}, \quad (4.6)$$

donde

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_{11} & \psi_{12} & \cdots & \psi_{1N} \\ \psi_{21} & \psi_{22} & \cdots & \psi_{2N} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \psi_{N1} & \psi_{N2} & \cdots & \psi_{NN} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \Psi_j = \begin{pmatrix} \psi_{11} & c_1 & \cdots & \psi_{1N} \\ \psi_{21} & c_2 & \cdots & \psi_{2N} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \psi_{N1} & c_N & \cdots & \psi_{NN} \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

cuyas entradas están dadas por

$$\psi_{ij} = \int_0^T g_i(r_0, t)g_j(r_0, t)dt, \quad 1 \leq i, \quad j \leq N, \quad (4.8)$$

es decir, el producto interno en  $L_2(0, T)$  de las funciones adjuntas (matriz de Gram), y la matriz  $\Psi_j$ , es obtenida reemplazando la  $j$ -ésima columna de  $\Psi$  por el vector de concentraciones críticas  $\bar{c} = (c_1, \cdots, c_N)^t$ .

Es fácil ver a partir de (4.8) que la matriz  $\Psi$  es simétrica. Además que  $\Psi$  es una matriz positiva semidefinida tal como mostramos a continuación

$$\begin{aligned} \vec{x}^t \Psi \vec{x} &= (x_1, x_2, \cdots, x_N) \begin{pmatrix} \psi_{11} & \psi_{12} & \cdots & \psi_{1N} \\ \psi_{21} & \psi_{22} & \cdots & \psi_{2N} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \psi_{N1} & \psi_{N2} & \cdots & \psi_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} \\ &= \left( \sum_{i=1}^N x_i \psi_{i1}, \sum_{i=1}^N x_i \psi_{i2}, \cdots, \sum_{i=1}^N x_i \psi_{iN} \right) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} \\ &= x_1 \sum_{i=1}^N x_i \psi_{i1} + x_2 \sum_{i=1}^N x_i \psi_{i2} + \cdots + x_N \sum_{i=1}^N x_i \psi_{iN} \\ &= \int_0^T \left[ x_1 \sum_{i=1}^N x_i g_i g_1 + x_2 \sum_{i=1}^N x_i g_i g_2 + \cdots + x_N \sum_{i=1}^N x_i g_i g_N \right] dt, \quad g_i = g_i(r_0, t) \\ &= \int_0^T \left[ (x_1 g_1 + x_2 g_2 + \cdots + x_N g_N) \left( \sum_{i=1}^N x_i g_i \right) \right] dt \\ &= \int_0^T \left( \sum_{i=1}^N x_i g_i \right) \left( \sum_{i=1}^N x_i g_i \right) dt = \left( \sum_{i=1}^N x_i g_i, \sum_{i=1}^N x_i g_i \right) \\ &= \left\| \sum_{i=1}^N x_i g_i(r_0, t) \right\|^2 \geq 0, \end{aligned}$$

por lo tanto

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

para cualquier vector  $\vec{x} \in R^N$  no cero. Donde hemos utilizado en la última desigualdad  $\|\cdot\|$  como la norma en  $L_2(0, T)$ .

En el caso de que las funciones adjuntas  $\{g_i(r_0, t)\}_{i=1}^N$  sean linealmente independientes, la matriz  $\Psi$  es positiva definida, y por lo tanto no-singular. En este caso la razón de descarga óptima está dada por

$$Q^*(t) = \sum_{j=1}^N \frac{\det(\Psi_j)}{\det(\Psi)} g_j(r_0, t), \quad (4.9)$$

donde  $\Psi$  y  $\Psi_j$  están dadas por (4.6) y (4.7).

Por último, debe notarse por el Teorema 2 que  $Q^*(t)$  dada por (4.9) es la razón de descarga óptima solamente si es una función no negativa en el intervalo  $(0, T)$ . Esta condición se satisface cuando el vector de concentraciones críticas  $\bar{c} = (c_1, \dots, c_N)^t$  está dentro del cono convexo (Lueberger, 1984), el cual está determinado por las columnas de la matriz  $\Psi$ . Si este es el caso, todos los coeficientes  $\alpha_j$  ( $i = 1, \dots, N$ ) en (4.3) son no negativos. En particular, este es el caso cuando las soluciones adjuntas  $\{g_i(r_0, t)\}_{i=1}^N$  son funciones ortogonales, es decir,  $\psi_{ij} = 0$  para  $i \neq j$ , por lo tanto tenemos

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \psi_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \psi_{jj} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \psi_{NN} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \Psi_j = \begin{pmatrix} \psi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_j & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \psi_{NN} \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

y los multiplicadores de Lagrange están dados por

$$\alpha_j = \frac{\det(\Psi_j)}{\det(\Psi)} = \frac{\psi_{11}\psi_{22}\cdots c_j \cdots \psi_{NN}}{\psi_{11}\psi_{22}\cdots \psi_{jj} \cdots \psi_{NN}} = \frac{c_j}{\psi_{jj}},$$

por lo tanto la razón de descarga óptima se expresa como

$$Q^*(t) = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{c_j}{\int_0^T g_j^2(r_0, t) dt} \right\} g_j(r_0, t). \quad (4.11)$$

### 4.3. Sitio de descarga óptimo

Ahora analizaremos diferentes casos con el fin de seleccionar el punto óptimo de descarga  $r_0$ . El criterio para seleccionar tal punto es minimizar la masa del nutriente suministrado al sistema acuático.

Si tenemos solo una zona contaminada,  $N = 1$ , de (4.3) y (4.4), obtenemos

$$Q^* = \alpha_1 g_1(r_0, t),$$

$$c_1 = \alpha_1 \int_0^T g_1^2(r_0, t) dt,$$

**Demostración.** Tenemos que  $m(Q)$  es un funcional estrictamente convexo (Lema 3) definido sobre el conjunto convexo  $\Theta$  (Lema 1), su mínimo, si existe, es global y único (Cheney 1966).

Por otro lado,  $L_2(0, T)$  es un espacio de Hilbert y también un espacio uniformemente convexo de Banach (Cheney, 1966). Además, por los Lemas 1 y 2, el espacio  $\Theta$  es un conjunto cerrado y convexo en  $L_2(0, T)$ .

Notemos que  $Q \equiv 0 \notin \Theta$ , ya que las concentraciones críticas (3.27) son positivas para cualquier  $i$  ( $i = 1, \dots, N$ ). Por lo tanto por el Lema 4 existe un punto  $Q^* \in \Theta$  que minimiza la distancia entre el conjunto  $\Theta$  y el punto  $Q \equiv 0$ . Este punto es solución del problema (3.25)-(3.27).

## 4.2. Razón de descarga óptima

Las expresiones analíticas para la razón de descarga óptima  $Q^*$  pueden obtenerse aplicando el método de multiplicadores de Lagrange (Smith, 1998) al problema variacional (3.25)-(3.27).

Sea

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

el funcional de Lagrange y  $\alpha_i$  los multiplicadores de Lagrange. La primera variación de  $F$  en el sentido de Gateaux (Smith, 1998), se calcula de la siguiente forma

$$\delta F(Q; \delta Q) = \frac{\partial}{\partial \epsilon} F(Q + \epsilon \delta Q)_{\epsilon=0} = \int_0^T \left\{ Q(t) - \sum_{j=1}^N \alpha_j g_j(r_0, t) \right\} \delta Q dt \quad (4.2)$$

donde  $\delta Q$  es una variación de  $Q$ .

De acuerdo a Smith (1998), para que  $Q^*$  sea la razón de descarga óptima o el mínimo, se debe de cumplir:

$$\delta F(Q^*; \delta Q) = 0 \quad \text{para toda } \delta Q.$$

Por lo tanto de (4.2) se deduce que la razón de descarga óptima está dada por:

$$Q^*(t) = \sum_{j=1}^N \alpha_j g_j(r_0, t) \quad (4.3)$$

donde los multiplicadores de Lagrange  $\alpha_i$  pueden determinarse a partir del siguiente sistema de ecuaciones lineales

$$\sum_{j=1}^N \alpha_j \left\{ \int_0^T g_i(r_0, t) g_j(r_0, t) dt \right\} = c_i, \quad (i = 1, \dots, N), \quad (4.4)$$

de las cuales se tiene que la descarga óptima de nutriente está dada por

$$Q^*(t) = \frac{c_1}{\int_0^T g_1^2(r_0, t) dt} = \frac{c_1}{\|g_1\|^2} g_1(r_0, t),$$

donde  $\|\cdot\|$  es la norma en  $L_2(0, T)$ .

Aplicando la norma en ambos lados de la última ecuación, obtenemos

$$\|Q^*\|^2 = \left\| \frac{c_1}{\|g_1(r_0, t)\|^2} g_1(r_0, t) \right\|^2 = \frac{c_1^2 \|g_1(r_0, t)\|^2}{\|g_1(r_0, t)\|^4} = \frac{c_1^2}{\|g_1(r_0, t)\|^2} = \frac{c_1^2}{\int_0^T g_1^2(r_0, t) dt}. \quad (4.12)$$

Por lo tanto, para minimizar  $\|Q^*\|^2$  tenemos que maximizar la integral  $\int_0^T g_1^2(r_0, t) dt$ . De esta forma el sitio óptimo es el punto  $r_0$  que maximiza el área bajo la curva de la función  $g_1^2(r_0, t)$ ,  $t \in (0, T)$ .

Cuando tenemos más de una zona contaminada,  $N > 1$ , y las soluciones adjuntas  $\{g_i(r_0, t)\}_{i=1}^N$  son funciones ortogonales, entonces a partir de (4.11) obtenemos,

$$\begin{aligned} \|Q^*\|^2 &= \int_0^T \left( \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{c_j}{\int_0^T g_j^2(r_0, t) dt} \right\} g_j(r_0, t) \right) \left( \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{c_j}{\int_0^T g_j^2(r_0, t) dt} \right\} g_j(r_0, t) \right) dt \\ &= \int_0^T \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{c_j}{\int_0^T g_j^2(r_0, t) dt} g_j(r_0, t) \right\}^2 dt = \sum_{j=1}^N \int_0^T \left\{ \frac{c_j}{\int_0^T g_j^2(r_0, t) dt} g_j(r_0, t) \right\}^2 dt \\ &= \sum_{j=1}^N \frac{c_j^2}{\|g_j(r_0, t)\|^4} \int_0^T g_j^2(r_0, t) dt = \sum_{j=1}^N \frac{c_j^2}{\|g_j(r_0, t)\|^4} \|g_j(r_0, t)\|^2 \\ &= \sum_{j=1}^N \frac{c_j^2}{\|g_j(r_0, t)\|^2} \end{aligned} \quad (4.13)$$

Por lo tanto el punto de descarga óptimo debe seleccionarse de tal forma que minimice la suma definida por (4.13). Además de las ecuaciones (4.12) y (4.13) podemos observar que las funciones adjuntas deben cumplir la siguiente condición

$$g_i(r_0, t) > 0 \quad \text{en un intervalo abierto} \quad I_i \in (0, T), \quad 1 \leq i \leq N.$$

En el caso más general, se tienen varias zonas contaminadas ( $N > 1$ ), y las funciones adjuntas  $\{g_i(r_0, t)\}_{i=1}^N$  no son ortogonales, de (4.3) obtenemos

$$\|Q^*\|^2 = \int_0^T \left( \sum_{j=1}^N \alpha_j g_j(r_0, t) \right) \left( \sum_{j=1}^N \alpha_j g_j(r_0, t) \right) = \vec{\alpha}^t \Psi \vec{\alpha},$$

donde  $\Psi$  esta dada por (4.6) y  $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)^t$  es el vector de multiplicadores de Lagrange.

De la ecuación (4.4) obtenemos

$$\vec{\alpha} = \Psi^{-1} \vec{c},$$

por lo tanto

$$\|Q^*\|^2 = (\Psi^{-1} \vec{c})^t \Psi (\Psi^{-1} \vec{c}) = \vec{c}^t \Psi^{-1} \vec{c} = \vec{c}^t \vec{\alpha},$$

por que  $\Psi = \Psi^t$ .

Sustituyendo los vectores  $\vec{c}$  y  $\vec{\alpha}$  (4.6) en la expresión anterior, podemos reescribir  $\|Q^*\|^2$  de la siguiente forma

$$\|Q^*\|^2 = (c_1, c_2, \dots, c_N) \begin{pmatrix} \det(\Psi_1(r_0))/\det(\Psi(r_0)) \\ \det(\Psi_2(r_0))/\det(\Psi(r_0)) \\ \vdots \\ \det(\Psi_N(r_0))/\det(\Psi(r_0)) \end{pmatrix} = \frac{1}{\det(\Psi(r_0))} \sum_{j=1}^N \det(\Psi_j(r_0)) c_j, \quad (4.14)$$

por lo tanto

$$\|Q^*\|^2 = \frac{1}{\det(\Psi(r_0))} \sum_{j=1}^N \det(\Psi_j(r_0)) c_j. \quad (4.15)$$

Con lo cual el punto de descarga óptimo  $r_0$  debe seleccionarse tal que minimice la suma definida por (4.15) entre los puntos  $r \in D$  tal que  $\det(\Psi(r)) \neq 0$ .

Notemos también que en todos los casos, la función objetivo  $\|Q^*\|$  es una función no lineal de tres variables, es decir, de las coordenadas de  $r_0 = (x_0, y_0, z_0)$ , y pueden ser evaluados cuando todas las funciones adjuntas  $g_i$ , ( $i = 1, \dots, N$ ) están completamente determinadas.



# Esquemas numéricos y ejemplos

---

Debido a la complejidad del problema de dispersión y su adjunto no es posible en general obtener soluciones analíticas para estos problemas. En este capítulo se presenta un esquema eficiente para obtener las soluciones numéricas de los modelos descritos. En particular, tal esquema se aplica para calcular las funciones adjuntas y resolver el problema de control de descarga de un nutriente.

## 5.1. Separación de operadores componente por componente

Varios problemas complejos a menudo pueden ser reducidos a una serie de problemas más simples. El método de separación de operadores establece que el problema

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + A\phi = f, \quad \text{en } [0, T], \quad (5.1)$$

donde  $A$  es un operador semidefinido positivo ( $A \geq 0$ ), es posible resolverlo separando  $A$  como la suma de varios operadores  $A_i$ , es decir

$$A = \sum_i A_i, \quad (5.2)$$

donde los operadores  $A_i$  son también positivos semidefinidos  $A_i \geq 0$ .

La descomposición de operadores tiene muchas aplicaciones. Por ejemplo, en modelos atmosféricos se pueden separar procesos físicos, por ejemplo: procesos barotrópicos y baroclínicos, advectivos y turbulentos, etc. (Skiba, 1997; Skiba, 1993; Marchuck, 1986). O bien, se puede separar un proceso o grupo de procesos físicos en cada coordenada geográfica  $(x, y, z)$ , a este esquema se le conoce como separación componente por componente.

En el capítulo 2 se mostró que el operador  $A$  del modelo de dispersión es positivo semidefinido (3.12), por lo tanto podemos aplicar el método de separación componente por

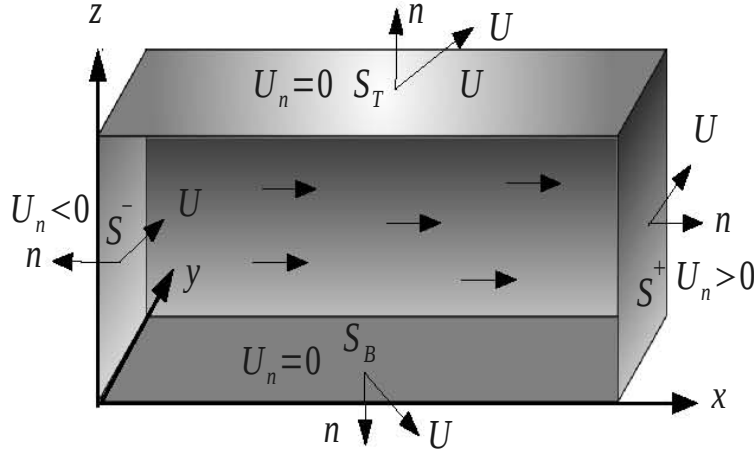


Figura 5.1: Dominio  $D = [0, X] \times [0, Y] \times [0, Z]$  de descomposición del operador  $A$  del modelo de dispersión (3.1).

componente. Utilizando la ecuación de continuidad (3.8), el operador  $A$  de la ecuación (3.1) puede reescribirse como  $A = A_1 + A_2 + A_3$ , donde

$$\begin{aligned}
 A_1 &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (u\phi) + \frac{1}{2} u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{1}{3} \sigma \phi, \\
 A_2 &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} (\nu\phi) + \frac{1}{2} \nu \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \mu \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{1}{3} \sigma \phi, \\
 A_3 &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} (\tilde{w}\phi) + \frac{1}{2} \tilde{w} \frac{\partial \phi}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{1}{3} \sigma \phi,
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

y  $\tilde{w} = w - \nu_s$ .

Para mostrar que cada operador unidimensional  $A_i$ , es positivo semidefinido (Skiba, 1993), supongamos sin pérdida de generalidad que el dominio  $D$  es un cubo  $[0, X] \times [0, Y] \times [0, Z]$  (ver figura 5.1).

Para el operador  $A_1$  evaluamos  $(A_1\phi, \phi)$ , entonces

$$\begin{aligned}
 (A_1\phi, \phi) &= \int_0^X \phi A_1 \phi dx = \int_0^X \left\{ \frac{1}{2} \phi \frac{\partial}{\partial x} (u\phi) + \frac{1}{2} u \phi \frac{\partial \phi}{\partial x} - \phi \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{1}{3} \sigma \phi^2 \right\} dx \\
 &= \int_0^X \left\{ \frac{1}{2} \phi^2 \frac{\partial u}{\partial x} + u \phi \frac{\partial \phi}{\partial x} - \phi \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{1}{3} \sigma \phi^2 \right\} dx,
 \end{aligned}$$

e integrando por partes las siguientes integrales, obtenemos

$$\begin{aligned}
 \int_0^X \frac{1}{2} \phi^2 \frac{\partial u}{\partial x} dx &= \frac{1}{2} u \phi^2 \Big|_0^X - \int_0^X u \phi \frac{\partial \phi}{\partial x} dx, \\
 \int_0^X \phi \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial \phi}{\partial x} dx &= \mu \phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_0^X - \int_0^X \mu \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 dx,
 \end{aligned}$$

y sustituyendo las integrales obtenemos

$$\int_0^X \phi A_1 \phi dx = \frac{1}{3} \int_0^X \sigma \phi^2 dx + \int_0^X \mu \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 dx + \left[ \frac{1}{2} \phi^2 u - \mu \phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_0^X.$$

Asumiendo que  $u(0) > 0$  y  $u(X) > 0$ . Entonces el punto de frontera  $x = 0$  pertenece a  $S^-$ , mientras que el punto  $x = X$  pertenece a  $S^+$  (ver figura 5.1). Con las condiciones de frontera (3.4) y (3.5) en los puntos  $x = 0$  y  $x = X$  respectivamente, el último término puede reescribirse como

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

Además considerando que  $\sigma > 0$  y  $\mu > 0$ , concluimos que

$$(A_1 \phi, \phi) = \int_0^Z \int_0^Y \int_0^X \phi A_1 \phi dx dy dz \geq 0,$$

por lo tanto el operador  $A_1$  es positivo semidefinido.

De la misma forma se puede mostrar que  $A_2$  y  $A_3$  son también operadores positivos semidefinidos. Debe notarse que esta prueba es verdadera para cualquier región  $D$ , la cual considerarse como la unión de un número finito de cubos.

Por otro lado el operador adjunto de  $A^*$ , del problema (3.15)-(3.21), puede ser presentado como la suma  $A^* = A_1^* + A_2^* + A_3^*$ , donde

$$\begin{aligned} A_1^* g &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (ug) + \frac{1}{2} u \frac{\partial g}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{1}{3} \sigma g, \\ A_2^* g &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} (ug) + \frac{1}{2} u \frac{\partial g}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \mu \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{1}{3} \sigma g, \\ A_3^* g &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial z} (\tilde{w}g) + \frac{1}{2} \tilde{w} \frac{\partial g}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{1}{3} \sigma g. \end{aligned} \tag{5.4}$$

## 5.2. Discretización de operadores

Los problemas (3.1)-(3.8) y (3.15)-(3.21) se resuelven en tiempo con el método de separación (Marchuk y Skiba, 1976; Skiba 1999). Suponemos por simplicidad que  $\mu = \mu(z)$ , y definimos las funciones netas sobre diferentes mallas, tal como se muestra la figura 5.2

$$\begin{aligned} \phi_{ijk} &= \phi(x_i, y_j, z_k), & u_{ijk} &= u(x_{i-1/2}, y_j, z_k), & \nu_{ijk} &= \nu(x_i, y_{j-1/2}, z_k). \\ w_{ijk} &= w(x_i, y_j, z_{k-1/2}), & \mu_k &= \mu(z_k), & \nu_{ijk} &= \nu(x_i, y_j, z_{k-1/2}). \end{aligned}$$

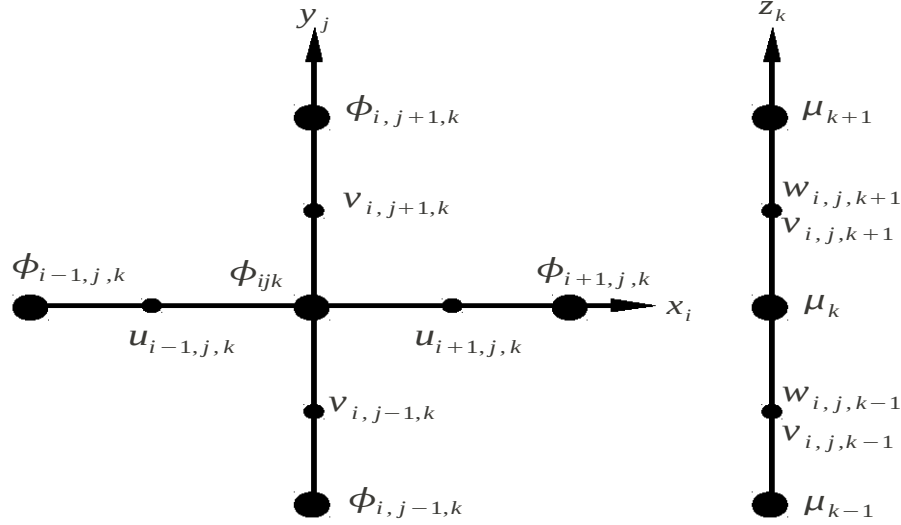


Figura 5.2: Posición de los nodos de la malla para las variables  $\phi$ ,  $u$ ,  $v$ ,  $w$ ,  $\mu$ .

Las fórmulas de aproximación de segundo orden para cada término de los operadores  $A_i$  sobre una malla doble (tipo-C de Arakawa) son:

$$\frac{1}{3}\sigma\phi \cong \frac{1}{3}\sigma\phi_i, \quad (5.5)$$

$$\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u\phi) + \frac{1}{2}u\frac{\partial\phi}{\partial x} \cong \frac{1}{2\Delta x}[u_{i+1}\phi_{i+1} - u_i\phi_{i-1}], \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\mu\frac{\partial\phi}{\partial x} \cong \frac{\mu_k}{(\Delta x)^2}[\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}], \quad (5.7)$$

por lo tanto las aproximaciones discretas de segundo orden de  $A_j$  y la ecuación de continuidad (3.8) tienen la forma (índices invariables  $i$ ,  $j$ ,  $k$  se omiten).

$$(A_1^h\phi)_{ijk} = \frac{1}{2\Delta x}[u_{i+1}\phi_{i+1} - u_i\phi_{i-1}] - \frac{\mu_k}{(\Delta x)^2}[\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}] + \frac{1}{3}\sigma\phi_i, \quad (5.8)$$

$$(A_2^h\phi)_{ijk} = \frac{1}{2\Delta y}[\nu_{j+1}\phi_{j+1} - \nu_j\phi_{j-1}] - \frac{\mu_k}{(\Delta y)^2}[\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}] + \frac{1}{3}\sigma\phi_j, \quad (5.9)$$

$$(A_3^h\phi)_{ijk} = \frac{1}{2\Delta z}[\tilde{w}_{k+1}\phi_{k+1} - \tilde{w}_k\phi_{k-1}] - \frac{1}{(\Delta z)^2}[\mu_{k+1}(\phi_{k+1} - \phi_k) - \mu_k(\phi_k - \phi_{k-1})] + \frac{1}{3}\sigma\phi_k, \quad (5.10)$$

$$\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \frac{v_{j+1} - v_j}{\Delta y} + \frac{w_{k+1} - w_k}{\Delta z} = 0, \quad (5.11)$$

donde se han utilizado fórmulas similares a las ecuaciones (5.5-5.7) para discretizar los operadores  $A_2$  y  $A_3$  sobre las direcciones  $y$  y  $z$ .

Los operadores adjuntos  $(A_i^h)^*$  se obtienen con la substitución de  $-u$ ,  $-v$ ,  $-\tilde{w}$  y  $g$  por  $u$ ,  $v$ ,  $\tilde{w}$  y  $\phi$  en (5.8)-(5.10), obteniendo

$$(A_1^h g)_{ijk} = -\frac{1}{2\Delta x}[u_{i+1}g_{i+1} - u_i g_{i-1}] - \frac{\mu_k}{(\Delta x)^2}[g_{i+1} - 2g_i + g_{i-1}] + \frac{1}{3}\sigma g_i, \quad (5.12)$$

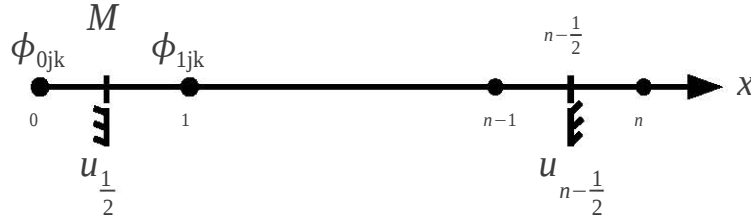


Figura 5.3: Posición de los nodos de la malla adyacentes a las fronteras en el eje  $x$  manteniendo  $j$  y  $k$  constantes.

$$(A_2^h g)_{ijk} = -\frac{1}{2\Delta y}[\nu_{j+1}g_{j+1} - \nu_j g_{j-1}] - \frac{\mu_k}{(\Delta y)^2}[g_{j+1} - 2g_j + g_{j-1}] + \frac{1}{3}\sigma g_j, \quad (5.13)$$

$$(A_3^h g)_{ijk} = -\frac{1}{2\Delta z}[\tilde{w}_{k+1}\phi_{k+1} - \tilde{w}_k g_{k-1}] - \frac{1}{(\Delta z)^2}[\mu_{k+1}(g_{k+1} - g_k) - \mu_k(g_k - g_{k-1})] + \frac{1}{3}\sigma g_k. \quad (5.14)$$

Para discretizar las condiciones de frontera, damos solo un ejemplo (ver Skiba, 1993 para más detalles). Sea  $u_{ijk}$  un valor positivo de la componente  $u$  del vector velocidad en el punto  $M = (x_{1/2}, y_j, z_k)$  en la frontera de la izquierda de la malla del dominio (ver figura 5.3). Entonces  $U_n = -u_{1jk} < 0$ , y el punto  $M$  pertenece a  $S^-$ , y las condiciones (3.5) y (3.19) se aproximan de la siguiente forma:

$$\frac{\mu_k(\phi_{0jk} - \phi_{1jk})}{\Delta x} + \frac{u_{1jk}(\phi_{0jk} + \phi_{1jk})}{2} = 0, \quad g_{0jk} = g_{1jk}. \quad (5.15)$$

Para cualquier  $i = 1, 2, 3$ , los operadores discretos  $A_i^h$  y  $(A_i^h)^*$  son positivos semidefinidos, y todos son antisimétricos sobre la diagonal si  $\mu = \sigma = 0$  y  $S$  es la línea de costa ( $U_n = 0$  sobre todo los puntos sobre  $S$ ).

En cada intervalo de paso de tiempo doble  $(t_n - \Delta t, t_n + \Delta t)$  tal como se muestra en la figura 5.4, los esquemas numéricos para el problema directo y el problema adjunto toman la siguiente forma:

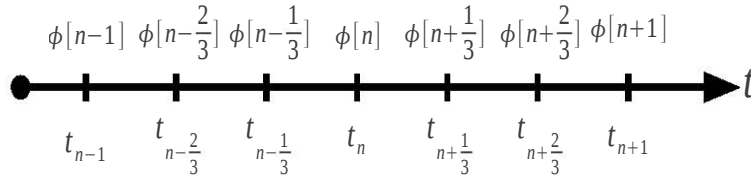


Figura 5.4: Discretización del tiempo en el intervalo  $(t_n - \Delta t, t_n + \Delta t)$ .

$$\begin{aligned} \Phi[n - \frac{2}{3}] - \Phi[n - 1] &= -\frac{\tau}{2}A_1^h(\Phi[n - \frac{2}{3}] + \Phi[n - 1]) \\ \Phi[n - \frac{1}{3}] - \Phi[n - \frac{1}{3}] &= -\frac{\tau}{2}A_2^h(\Phi[n - \frac{1}{3}] + \Phi[n - \frac{2}{3}]) \\ \Phi[n + \frac{1}{3}] - \Phi[n - \frac{1}{3}] &= -\frac{\tau}{2}A_3^h(\Phi[n + \frac{1}{3}] + \Phi[n - \frac{1}{3}]) + 2\tau q[n] \end{aligned} \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned}\Phi \left[ n + \frac{2}{3} \right] - \Phi \left[ n + \frac{1}{3} \right] &= -\frac{\tau}{2} A_2^h \left( \Phi \left[ n + \frac{2}{3} \right] + \Phi \left[ n + \frac{1}{3} \right] \right) \\ \Phi \left[ n + 1 \right] - \Phi \left[ n + \frac{2}{3} \right] &= -\frac{\tau}{2} A_1^h \left( \Phi \left[ n + 1 \right] + \Phi \left[ n + \frac{2}{3} \right] \right)\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}G \left[ n + \frac{2}{3} \right] - G \left[ n - 1 \right] &= -\frac{\tau}{2} (A_1^h)^* \left( G \left[ n + 1 \right] + G \left[ n + \frac{2}{3} \right] \right) \\ G \left[ n + \frac{1}{3} \right] - G \left[ n - \frac{2}{3} \right] &= -\frac{\tau}{2} (A_2^h)^* \left( G \left[ n + \frac{2}{3} \right] + G \left[ n + \frac{1}{3} \right] \right) \\ G \left[ n - \frac{1}{3} \right] - G \left[ n + \frac{1}{3} \right] &= -\frac{\tau}{2} (A_3^h)^* \left( G \left[ n + \frac{1}{3} \right] + G \left[ n - \frac{1}{3} \right] \right) + 2\tau p[n] \quad (5.17) \\ G \left[ n - \frac{2}{3} \right] - G \left[ n - \frac{1}{3} \right] &= -\frac{\tau}{2} (A_2^h)^* \left( G \left[ n - \frac{1}{3} \right] + G \left[ n - \frac{2}{3} \right] \right) \\ G \left[ n - 1 \right] - G \left[ n - \frac{2}{3} \right] &= -\frac{\tau}{2} (A_1^h)^* \left( G \left[ n - \frac{2}{3} \right] + G \left[ n - 1 \right] \right)\end{aligned}$$

donde  $\Phi$  y  $G$  son los vectores formados por los valores de las soluciones  $\phi$  y  $g$  en los puntos de malla en pasos fraccionarios de tiempo, además  $q$  y  $p$  son vectores formados por los valores sobre la malla de la razón de descarga para el problema directo  $Q(t)$  y el forzamiento  $p$  definido del problema adjunto para el tiempo  $t_n$ , respectivamente (Skiba, 1993).

Cada problema unidimensional discreto, es un esquema Crank-Nicolson el cual puede resolverse por una factorización eficiente y directa para una matriz tridiagonal (Marchuk y Skiba, 1976).

De (5.16) podemos eliminar a los vectores auxiliares obteniendose

$$\Phi[n+1] = T[n]\Phi[n-1] + 2\tau T_1[n]T_2[n]p[n], \quad (5.18)$$

con

$$T[n] = T_1[n]T_2[n]T_3[n]T_2[n]T_1[n] \quad \text{con} \quad T_i = \left( I - \frac{\tau}{2} A_i^j \right)^{-1} \left( I + \frac{\tau}{2} A_i^j \right).$$

y para (5.17) tenemos

$$G[n-1] = T[n]G[n+1] + 2\tau T_1[n]T_2[n]q[n], \quad (5.19)$$

con

$$T[n] = T_1[n]T_2[n]T_3[n]T_2[n]T_1[n] \quad \text{con} \quad T_i = \left( I - \frac{\tau}{2} (A_i^j)^* \right)^{-1} \left( I + \frac{\tau}{2} (A_i^j)^* \right).$$

Para mostrar la estabilidad de los esquemas (5.16) y (5.17), aplicamos primero la norma euclidiana sobre (5.18)

$$\begin{aligned}\|\Phi[n+1]\| &= \|T[n]\Phi[n-1] + 2\tau T_1[n]T_2[n]p[n]\| \\ &\leq \|T[n]\| \|\Phi[n-1]\| + 2\tau \|T_1[n]\| \|T_2[n]\| \|p[n]\|.\end{aligned} \quad (5.20)$$

Empleando el Lemma de Kellog, el cual establece que si  $A$  es una matriz semidefinida positiva y  $\sigma \geq 0$  una constante, se cumple la siguiente relación

$$\|(E - \sigma A)(E + \sigma A)^{-1}\| \leq 1,$$

por lo tanto podemos simplificar la expresión (5.20), a la siguiente expresión

$$\|\Phi[n+1]\| \leq \|\Phi[n-1]\| + 2\tau\|p[n]\| \quad (5.21)$$

De la misma forma puede mostrarse para (5.17) que se cumple

$$\|G[n-1]\| \leq \|G[n+1]\| + 2\tau\|q[n]\|. \quad (5.22)$$

Las desigualdades (5.21) y (5.22) manifiestan la estabilidad del algoritmo respecto a los vectores  $\Phi[n-1]$ ,  $G[n+1]$  y  $p[n]$ ,  $q[n]$  respectivamente para cualquier paso de tiempo  $\tau$ .

Para obtener la estimación adjunta de la ecuación (3.24), evaluamos la identidad de Lagrange para vectores y matrices reales, la cual está dada por

$$G^T A \Phi = (A^T G)^T \Phi \quad (5.23)$$

obteniendo como resultado la siguiente ecuación

$$G^*[n+1]\Phi[n+1] + \tau p^*[n] \left( \Phi[n + \frac{1}{3}] + \Phi[n - \frac{1}{3}] \right) = \tau \left( G^*[n - \frac{1}{3}] + G^*[n - \frac{2}{3}] \right) q[n] + G^*[n-1]\Phi[n-1] \quad (5.24)$$

para cada subintervalo  $[t_n - \Delta t, t_n + \Delta t]$ . Sumando la ecuación anterior sobre todos los subintervalos  $[0, T]$  (es decir, sobre  $n$ ) y usando las condiciones (3.7) y (3.21) podemos derivar la versión discreta de la estimación adjunta.

### 5.3. Reducción del problema de dispersión en 3D a un problema de 2D

Resolver la ecuación (3.1), es un problema bastante complicado, es por esta razón que consideramos a  $\phi_H(x, y)$  como la concentración promedio de nutriente sobre una columna de agua de altura  $H$  ubicada en el punto  $(x, y)$ , la cual definimos de la siguiente forma

$$\phi_H(x, y) = \frac{1}{H} \int_0^H \phi(x, y, z) dz, \quad (5.25)$$

de esta manera el problema se reduce a un problema bidimensional sobre las coordenadas  $x$ ,  $y$  tal como se muestra más adelante. Si consideramos que  $H$  es una altura constante, estamos considerando que el dominio  $D$  es un dominio de fondo plano, un dominio que cumple con esta condición es el de un canal de agua.

Si consideramos que sobre el canal se tiene que la componente vertical de la velocidad

del fluido es  $w = 0$ , la ecuación de difusión-advección (3.1) se reduce a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + \sigma \phi - \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) - \\ - \nu_s \frac{\partial \phi}{\partial z} = Q(t) \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0). \end{aligned} \quad (5.26)$$

Integrando la ecuación (5.26) sobre la componente vertical  $z$  sobre  $[0, H]$ , tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \int_0^H \phi dz \right) + u \frac{\partial}{\partial x} \left( \int_0^H \phi dz \right) + v \frac{\partial}{\partial y} \left( \int_0^H \phi dz \right) + \sigma \int_0^H \phi dz - \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial}{\partial x} \int_0^H \phi dz \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial}{\partial y} \int_0^H \phi dz \right) - \int_0^H \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) dz - \\ - \nu_s \int_0^H \frac{\partial \phi}{\partial z} dz = \int_0^H Q(t) \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) dz. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Ahora, si consideramos que el proceso de sedimentación lo podemos despreciar y que no hay evaporación sobre la superficie, tenemos que  $\nu_s = 0$  y  $\eta = 0$ , por lo tanto de las condiciones de frontera en la superficie  $S_T$  y en el fondo  $S_B$ , obtenemos:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} - \zeta \phi \vec{k} \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{sobre } S_T(z = H) \Rightarrow \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_H = 0. \\ \mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = \vec{\phi}_s \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{sobre } S_B(z = 0) \Rightarrow \mu \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_0 = 0, \end{aligned}$$

por lo tanto

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

Además, tenemos que

$$\begin{aligned} \nu_s \int_0^H \frac{\partial \phi}{\partial z} dz = 0, \\ \int_0^H Q(t) \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) dz = Q(t) \delta(x - x_0) \delta(y - y_0). \end{aligned}$$

Con los resultados anteriores y dividiendo la ecuación (5.27) por  $H$ , obtenemos la ecuación de transporte bidimensional para la concentración promedio de nutriente para cada columna de agua del dominio  $D$ ,

$$\frac{\partial \phi_H}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi_H - \nabla \cdot \mu \nabla \phi_H + \sigma \phi_H = \frac{Q(t)}{H} \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \quad (5.28)$$



cuyas condiciones de frontera e iniciales son:

$$\phi_H^0(x, y) = \frac{1}{H} \int_0^T \phi(r, 0) dz \quad \text{en } D, \quad (5.29)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{sobre } S^+ \quad (5.30)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} - U_n \phi = 0 \quad \text{sobre } S^- \quad (5.31)$$

La expresión para la concentración promedio sobre cada zona contaminada  $\Omega$  para el problema bidimensional es:

$$\begin{aligned} J(\phi) &= \frac{1}{|\Omega|\tau} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \phi(r, t) dx dy dz = \frac{1}{|\Omega^*|H\tau} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \phi(r, t) dx dy dz \\ &= \frac{1}{|\Omega^*|\tau} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \frac{1}{H} \phi(r, t) dx dy dz = \frac{1}{|\Omega^*|\tau} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega^*} \phi_H(r, t) dx dy = J(\phi_H) \end{aligned} \quad (5.32)$$

donde  $\Omega^*$  es el área superficial de la zona contaminada  $\Omega$ .

Por lo tanto el modelo directo del problema de transporte bidimensional es el siguiente:

$$\frac{\partial \phi_H}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi_H - \nabla \cdot \mu \nabla \phi_H + \sigma \phi_H = \frac{Q(t)}{H} \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \quad (5.33)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{sobre } S^+ \quad (5.34)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} - U_n \phi = 0 \quad \text{sobre } S^- \quad (5.35)$$

$$\phi_H^0(r, 0) = 0 \quad \text{en } D, \quad (5.36)$$

El modelo adjunto asociado lo construimos a través de la identidad de Lagrange, obteniéndose

$$-\frac{\partial g_H}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla g_H - \nabla \cdot \mu \nabla g_H + \sigma g_H = p(r, t) \quad (5.37)$$

$$\mu \frac{\partial \phi_H}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{sobre } S^- \quad (5.38)$$

$$\mu \frac{\partial g_H}{\partial \vec{n}} + U_n g_H = 0 \quad \text{sobre } S^+ \quad (5.39)$$

$$g_H^0(r, T) = 0 \quad \text{en } D, \quad (5.40)$$

donde el forzamiento  $p(r, t)$  está dado por

$$p(r, t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau|\Omega^*|} & \text{r} \in \Omega^* \text{ y } t \in (T - \tau, T) \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (5.41)$$

$$\text{sujeto a: } Q_l > 0, l = 1, \dots, L, \quad (5.45)$$

$$\sum_{l=1}^L Q_l g_{il} = \frac{c_i}{\Delta t} \quad (5.46)$$

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

El problema de optimización(5.44)-(5.46) tiene solución única. La existencia de la solución se sigue inmediatamente del hecho de que la función global  $m(\vec{Q})$  donde  $\vec{Q} = (Q_1, \dots, Q_L)$  es continua y el conjunto de factibilidad

$$\Theta = \left\{ \vec{Q} \in R^L; Q_l \geq 0, (l = 1, \dots, L) \quad \text{y} \quad \sum_{l=1}^L Q_l g_{il} = \frac{c_i}{\Delta t}, (i = 1, \dots, N) \right\} \quad (5.47)$$

es un conjunto compacto en  $R^L$  (Luenberger, 1984). La unicidad de la solución es consecuencia del hecho de que  $m(\vec{Q})$  es una función estrictamente convexa, y el conjunto  $\Theta$  es también un conjunto convexo (Luenberger, 1984). Asumimos que el conjunto de factibilidad  $\Theta$  es un conjunto no vacío. La solución óptima puede ser calculada eficientemente con una técnica de optimización numérica, por ejemplo, con la subrutina *lsqlin* de MATLAB. Los coeficientes  $g_{il}$  se determinaron resolviendo numéricamente el modelo adjunto (3.15)-(3.21) para cada zona  $\Omega_i$ , usando el método de separación descrito anteriormente.

## 5.5. Ejemplos

### 5.5.1. Ejemplo 2. Cálculo de funciones adjuntas y descargas óptimas

Para ilustrar el método desarrollado, consideramos un ejemplo simple de recuperación de un canal de 120 m de longitud [0,120], 10 m de ancho [0,10] y de 4 m de profundidad [0,4], H=4. El canal contiene tres zonas contaminadas ( $N = 3$ ):  $\Omega_1 = [20, 30] \times [9, 10] \times [0, 4]$ ,  $\Omega_2 = [70, 80] \times [9, 10] \times [0, 4]$  y  $\Omega_3 = [95, 100] \times [0, 2] \times [0, 4]$ , tal como se muestran en la figura 5.5.

Los parámetros del modelo adjunto (3.15)-(3.21) se tomaron de la siguiente forma: el campo de corriente  $\vec{U}$  está dirigido a lo largo del canal y es igual a  $30 \text{ mh}^{-1} \vec{i}$ ,  $\mu = 6 \text{ m}^2 \text{ h}^{-1}$ ,  $\sigma = 1 \text{ h}^{-1}$  y  $\zeta = \nu = 0$ . El nutriente se descarga en el punto  $r_0 = (3\text{m}, 2.2\text{m}, 2\text{m})$  durante 4 horas, entonces el intervalo de tiempo total es de 4 horas:  $(0, T) = (0, 4)$ , y las concentraciones críticas se debe alcanzar dentro de la última hora del intervalo de tiempo  $(3, 4)$ , es decir,  $\tau = 1 \text{ h}$ .

Las funciones adjuntas  $g_i(r_0, t)$  para las tres zonas ( $i = 1, 2, 3$ ) se muestran en la figura 5.6.

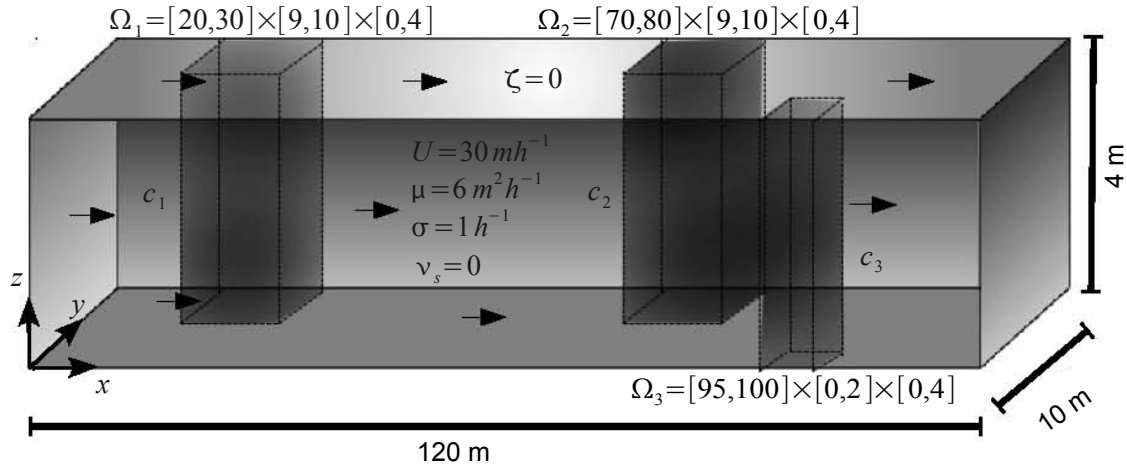


Figura 5.5: Biorremediación de un canal de fondo plano con tres zonas contaminadas.

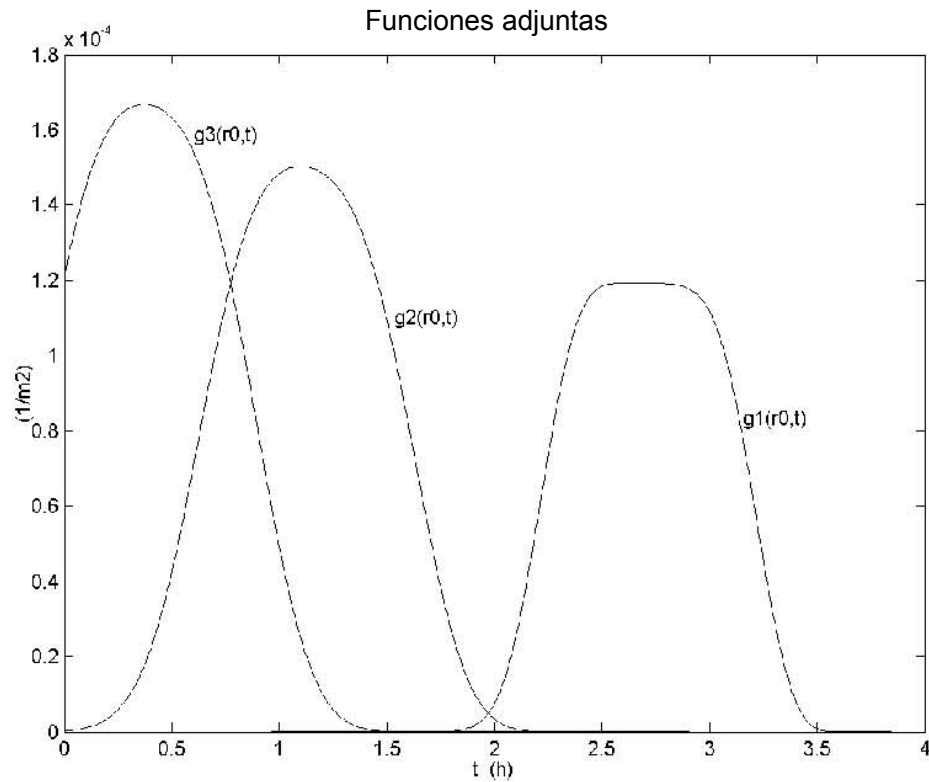


Figura 5.6: Funciones adjuntas  $g_i(r_0, t)$ ,  $i = 1, 2, 3$ .

En la tabla 5.1 se muestran las concentraciones críticas de nutriente  $c_i$  en las zonas  $\Omega_i$ , las cuales se requiere alcanzar en la ultima hora de descarga del nutriente, es decir  $\tau = 1$ .

Las concentraciones críticas  $c_i$  ( $g\text{r}m^{-3}$ ) de la tabla 5.1 varían de un experimento a otro, los cuales generan diferentes razones de descarga óptimas  $Q_k^*$  tal como se muestra en la figura (5.7).

el cual resulta ser un problema de valor final. Dicho problema puede transformarse a un problema de valores iniciales al considerar el cambio de variable  $t' = T - t$  y al considerar  $U' = -U$  es posible mostrar que el problema adjunto tiene la misma estructura que el problema directo.

Para ambos problemas bidimensionales es posible mostrar que son problemas bien planteados, es decir, es podemos mostrar la existencia, la unicidad y la estabilidad de ambos modelos.

Al igual que en problema 3D consideramos el método de separación de operadores para resolver el problema de transporte directo y el adjunto, es decir el operador del problema bidimensional  $A$  de la ecuación (5.33), lo podemos reescribir de la siguiente forma:

$$A = A_1 + A_2, \quad \text{donde} \quad A = A\phi = \vec{U} \cdot \nabla\phi - \nabla \cdot \mu \nabla\phi + \sigma\phi, \quad (5.42)$$

y

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

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

De forma similar resolvemos los problemas bidimensionales en tiempo sobre el intervalo de tiempo  $(t_n - \Delta t, t_n + \Delta t)$  con el siguiente esquema numérico de orden dos de aproximación:

$$\begin{aligned} \Phi [n - \frac{1}{2}] + \Phi [n - 1] &= -\frac{\tau}{2} A_1^h (\Phi [n - \frac{1}{2}] + \Phi [n - 1]) \\ \Phi [n] + \Phi [n - \frac{1}{2}] &= -\frac{\tau}{2} A_2^h (\Phi [n - \frac{1}{2}] - \tau q[n]) \\ \Phi [n + \frac{1}{2}] + \Phi [n] &= -\frac{\tau}{2} A_2^h (\Phi [n + \frac{1}{2}] + \tau q[n]) \\ \Phi [n + 1] - \Phi [n + \frac{1}{2}] &= -\frac{\tau}{2} A_1^h (\Phi [n + \frac{1}{2}] + \Phi [n + 1]) \end{aligned} \quad (5.43)$$

Para las discretizaciones espaciales se utilizaron las mismas mallas consideradas en la sección anterior.

## 5.4. Solución alternativa al problema de optimización

En el caso de que en la ecuación (4.9) no determine la razón de descarga óptima, la solución puede obtenerse por medio de la discretización de las integrales en el problema (1.3)-(1.5) con la fórmula de punto medio. Lo cual da como resultado el problema cuadrático de optimización en  $R^L$

$$\text{minimizar: } m(Q_1, \dots, Q_L) = \Delta t \sum_{l=1}^L Q_l^2(t) dt, \quad (5.44)$$

Caso	Zona 1	Zona 2	Zona3
	$c_1$	$c_2$	$c_3$
1	0.8	0.8	0.8
2	1.0	0.8	0.5
3	1.5	1.0	1.5
4	1.2	0.5	1.2
5	0.6	1.2	0.6
6	0.6	0.6	1.5
7	1.5	0.6	0.6

Tabla 5.1: Concentraciones críticas de nutrientes en las zonas  $\Omega_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ).

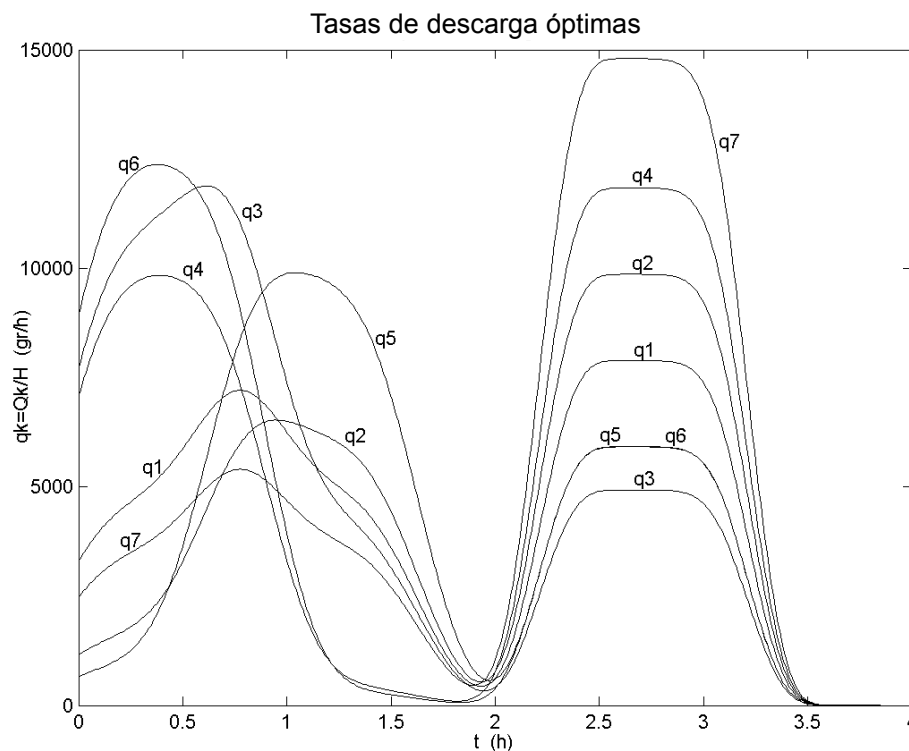


Figura 5.7: Razones de descarga óptimas  $q_k = Q_k(t)/H$ ,  $k = 1, 2, \dots, 7$ .

En la figura 5.8 se muestra la evolución de la concentración media en las zonas  $\Omega_i$  ( $N = 3$ ), para el caso 7 de la tabla 5.1.

Las isolíneas de concentración promedio del nutriente en el dominio  $D$  en el momento final  $T = 4h$  para el caso 7 se presentan en la figura 5.9, donde se ha empleado la razón de descarga óptima  $Q_7(t)$ . Además notemos que en todos los experimentos de la tabla 5.1, la razón de descarga óptima se ha podido determinar satisfactoriamente empleando la ecuación (4.12).

Los resultados anteriores se han comparado con las correspondientes soluciones numéri-

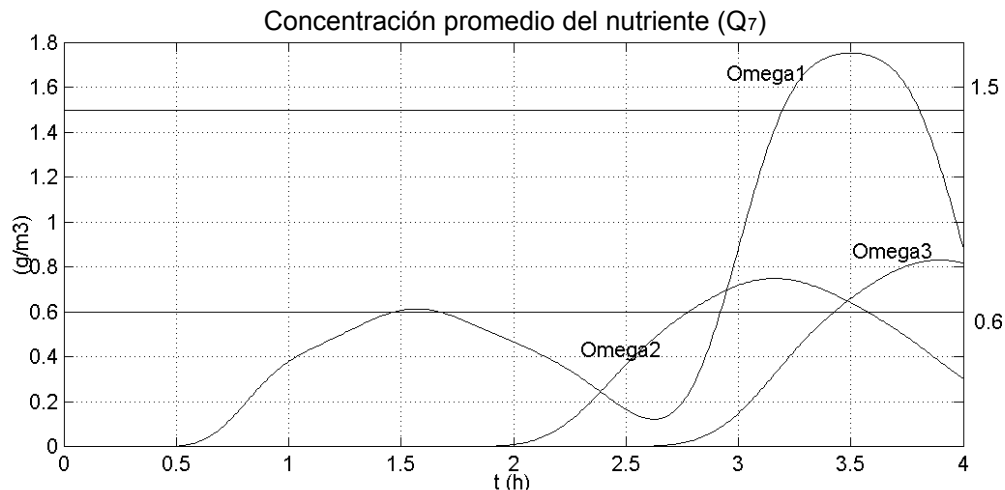


Figura 5.8: Evolución de la concentración de nutriente en las zonas  $\Omega_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ .

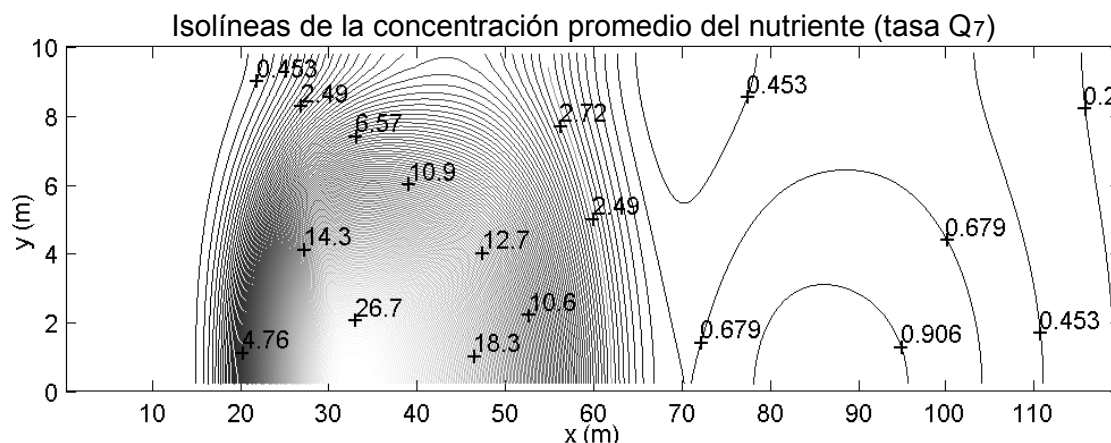


Figura 5.9: Isóneas de igual concentración de nutriente en la región  $D$  para  $T = 4$  h, considerando la razón de descarga  $Q_7(t)$ .

cas del problema (5.44)-(5.46) para  $L = 400$  por medio de la subrutina *lsqlin* de MATLAB. Debe de notarse que la principal ventaja de la ecuación (4.9), es que la razón de descarga óptima  $\vec{Q}_k^*$ , en cada experimento ( $k = 1, \dots, 7$ ), se calcula resolviendo el sistema lineal simétrico, positivo definido y una matriz bien condicionada de  $3 \times 3$

$$\Psi_j = 10^{-7} \begin{pmatrix} 0.1208 & 0.0001 & 0.0000 \\ 0.0001 & 0.1788 & 0.0759 \\ 0.0000 & 0.0759 & 0.2006 \end{pmatrix}, \quad (5.48)$$

cuyo número de condición es 2.33, mientras que la formulación numérica (5.44)-(5.46), requiere resolver un problema de optimización cuadrático con una matriz de  $400 \times 400$ , dado que  $L = 400$ . Sin embargo, la formulación numérica (5.44)-(5.46) es útil cuando la ecuación (4.9) da como resultado una función no positiva  $Q$ . Este es el caso, por ejemplo, cuando las concentraciones críticas de nutriente son  $c_1 = c_3 = 0.8 \text{ } \text{g} \text{m}^{-3}$  y  $c_2 = 0.2 \text{ } \text{g} \text{m}^{-3}$ . La ecuación

(4.9) determina  $Q = q_e$  (ver figura 5.10), la cual no puede ser la razón de descarga óptima por que esta función es negativa aproximadamente en el intervalo entre la primera y segunda hora. En contraste, la solución de (5.44)-(5.46),  $Q = q_{op}$  (ver figura 5.10), es una función no negativa en todo el intervalo de tiempo  $[0,4]$ , y de acuerdo al Teorema 2, debe ser la razón de descarga óptima.

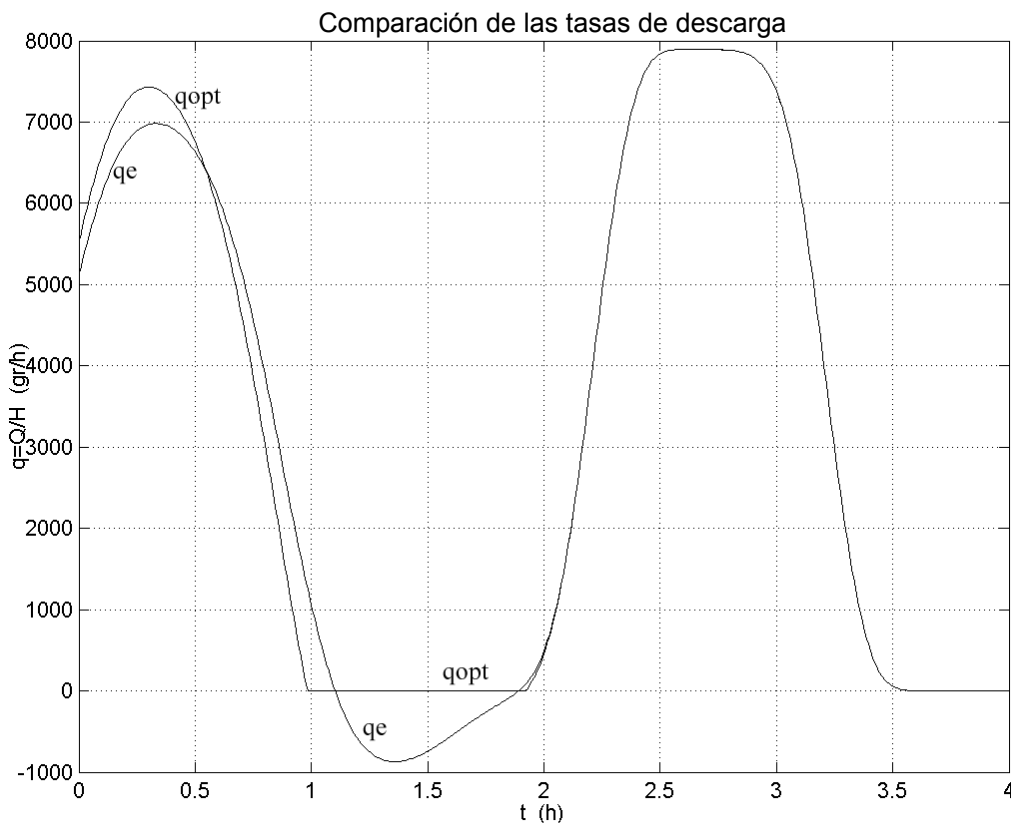


Figura 5.10: Razones de descarga

### 5.5.2. Ejemplo 3. Determinación del sitio óptimo

Consideramos un ejemplo sintético (bidimensional) de remediación en un canal de 120  $m$  de largo y 10  $m$  de ancho, que contiene  $N = 3$  zonas contaminadas. Las concentraciones críticas del bioestimulante son  $c_i = 0.8 \text{ grm}^{-3}$  ( $i = 1, 2, 3$ ), y los parámetros usados en los modelos (3.1)-(3.8) y (3.15)-(3.21), integrados en la dirección  $z$ , son:  $\phi(r, t) = 0$ ,  $\vec{U} = 30 \hat{i} \text{ mh}^{-1}$ ,  $\mu = 6 \text{ m}^2\text{h}^{-1}$ ,  $\sigma = 1\text{h}^{-1}$  y  $\zeta = \nu = 0$ . Las zonas contaminadas  $\Omega_i$  son:  $\Omega_1 = [20, 30] \times [9, 10]$ ,  $\Omega_2 = [70, 80] \times [9, 10]$  y  $\Omega_3 = [95, 100] \times [0, 2]$ .

Las funciones adjuntas correspondientes a este ejemplo, se muestran en la figura 5.12.

Consideramos ahora un punto de prueba  $r_1 = (3m, 2.2m)$  donde se realiza la descarga del bioestimulante durante  $T = 4 \text{ h}$ , y la concentración promedio se controló para la última

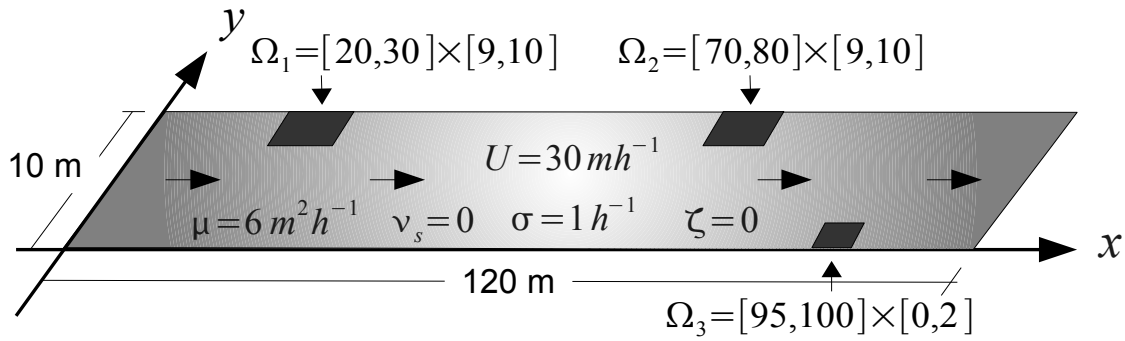


Figura 5.11: Biorremediación de un canal bidimensional con tres zonas contaminadas.

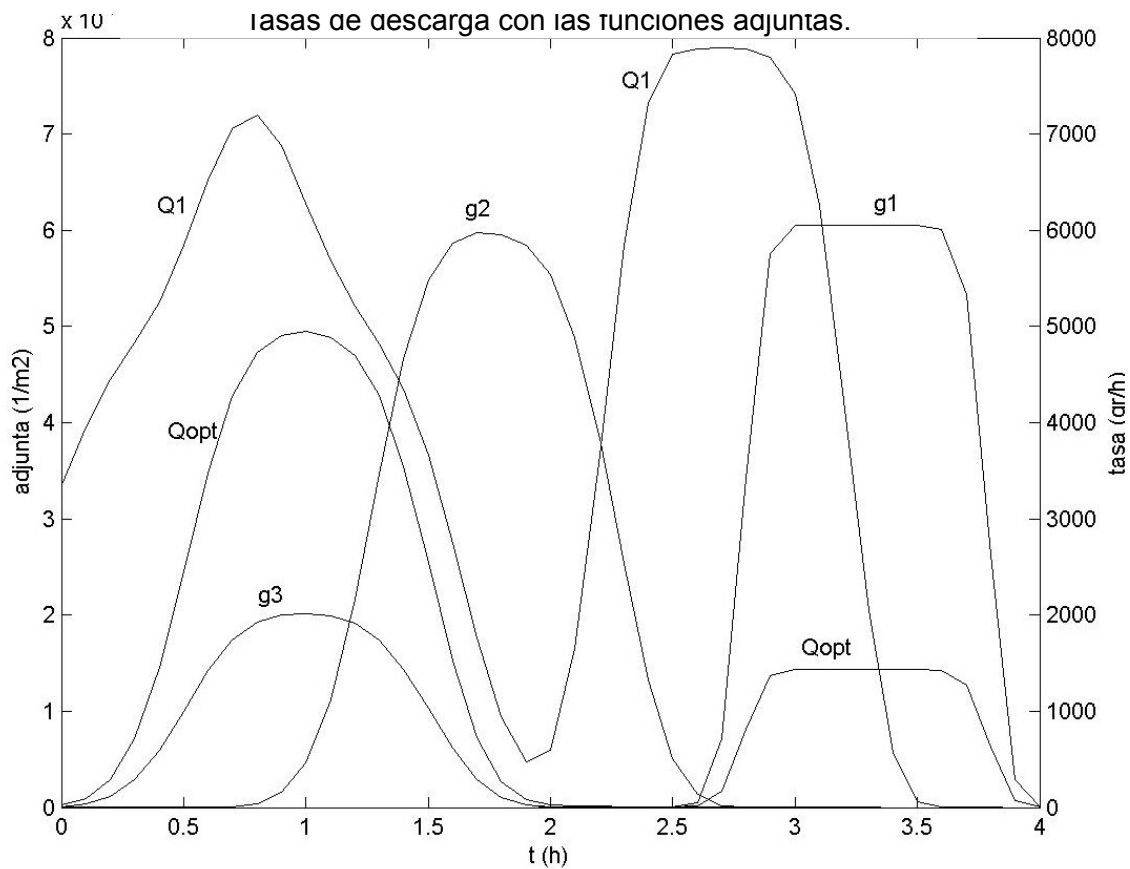


Figura 5.12: Tasas de descarga con las funciones adjuntas.

hora ( $\tau = 1 h$ ). Para el punto  $r_1$ , la tasa de descarga  $Q_1$  se determinó empleando (4.9) tal como se muestra en la figura 5.12

Para reducir el esfuerzo computacional en el proceso de minimización de la función objetivo  $\|Q^*\|^2$ , se deben considerar sólo los puntos  $r$  que están en el soporte de la siguiente función de indicación:

$$P(r_0) = \prod_{i=1}^N \int_0^T g_i(r, t) dt > 0.$$



en la figura 5.13 se muestra la función indicativa  $P$  obtenida por la ecuación anterior, de la cual obtenemos el soporte de la función de indicación,  $supp(P) \subset [0, 40] \times [6, 10]$ , y sobre este dominio, minimizamos la función  $\|Q^*\|^2$ , siendo el punto de descarga óptimo  $r_0^* = (21.8m, 6.6m)$ , cuyas funciones adjutas  $g_i(r_0^*, t)$  ( $i = 1, 2, 3$ ) asociadas al sitio óptimo se muestran en la figura (5.12) y a través de (4.9) se determinó la tasa óptima de suministro  $Q^* = Q_{opt}$  la cual se muestra en la figura (5.12). Como era esperado,  $Q_{opt}$  introduce menos masa al canal que  $Q_1$  ( $m^2(Q_1)/m^2(Q_{opt}) = 4.7$ ). De aquí la ventaja del método.

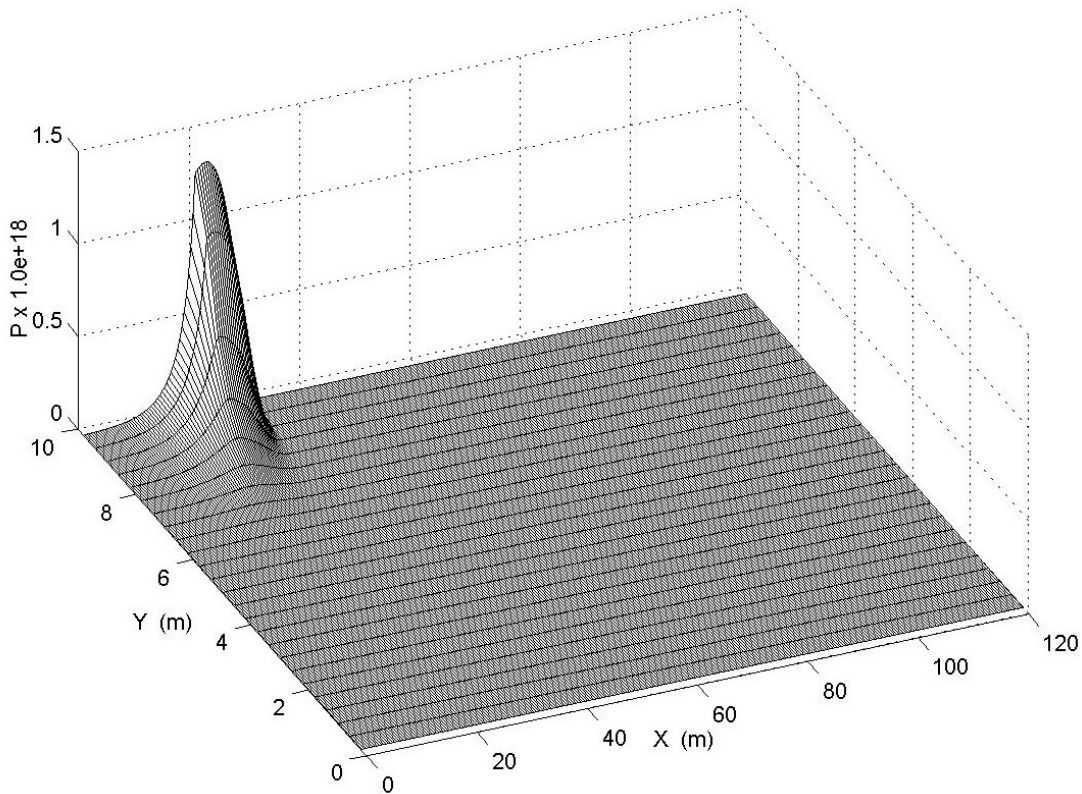


Figura 5.13: Función indicativa.

## Conclusiones

---

Los principales objetivos de la modelación matemática en la protección del medio ambiente son la predicción de concentraciones de diferentes sustancias (contaminantes, nutrientes, etc.), desarrollo de métodos para prevenir niveles altos de contaminantes peligrosos (control de emisiones) y desarrollo de estrategias de recuperación de zonas contaminadas. En este trabajo, se ha presentado un método de recuperación de un cuerpo de agua por medio de la técnica de biorremediación, donde se asume que el petróleo ha alcanzado algunas zonas sobre una columna de agua (1D) y un canal (3D) con el objetivo de liberar un nutriente con el propósito de incrementar la cantidad de microorganismos nativos en dichos cuerpos de agua, los cuales van a degradar los contaminantes en cada zona. Por lo tanto, los objetivos específicos son determinar los parámetros apropiados, es decir, el sitio  $r_0$  de descarga y la razón de descarga  $Q$ , para la liberación de nutrientes, con el fin de alcanzar ciertas concentraciones críticas de nutriente necesarias para la recuperación de las zonas contaminadas. Es importante notar que ambos parámetros desconocidos son seleccionados de tal forma que el impacto sobre el medio ambiente y al mismo tiempo, el costo de la remediación sean mínimos.

Para cumplir con los objetivos mencionados, en el capítulo 2 con el ejemplo unidimensional, mostramos que es posible resolver el problema de optimización resolviendo el problema de difusión y su problema inverso empleando el método de series de Fourier, el cual nos permitió obtener expresiones analíticas para determinar los parámetros de descarga óptimos. Sin embargo, este método requiere un esfuerzo computacional considerable ya que las expresiones obtenidas son series infinitas. En los capítulos 3-5 se mostró el método de solución del problema de control para un problema (3D) más general, en donde primero diseñamos, para cada punto  $r_0$ , la razón óptima de descarga  $Q(t)$  por medio del problema variacional (se ha demostrado la existencia y unicidad de su solución). Por lo tanto la solución analítica del problema variacional tiene el punto  $r_0$  como un parámetro ( $Q = Q(r_0)$ ) y por lo tanto, es posible escoger o seleccionar el sitio de descarga óptimo como el mínimo de la función real  $\|Q(t, r_0)\|^2$ . Además se ha mostrado un esquema de diferencias finitas de 2do orden absolutamente estable y balanceado. Basado en el método de separación y el esquema de Crank-Nicholson para la solución del problema principal y el problema adjunto de transporte (3D). Además, debido a las condiciones de frontera del problema 3D, tanto el problema principal y el problema adjunto son problemas bien planteados de acuerdo a Hadamard, esto es, la solución de cada problema, es única y estable ante perturbaciones iniciales.

El método propuesto en este trabajo para calcular el sitio y la tasa óptima de descarga de un bioestimulante, en un sistema acuático contaminado con petróleo consiste de dos etapas. La primera consiste en resolver el modelo adjunto de dispersión para obtener las funciones adjuntas  $g_i(r, t)$ , ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) sobre todos los puntos  $r$  del dominio  $D$ . La segunda fase consiste en minimizar la función real  $\|Q(t, r_0)\|^2$  para hallar el punto de descarga óptimo  $r_0^*$ . Para que el método sugerido sea aun más general y computacionalmente eficiente es necesario considerar las siguientes observaciones:

- Primero, si la condición de nutriente  $\phi(r, 0)$  no es cero, el problema variacional se resuelve considerando solo las zonas contaminadas donde

$$c'_i = c_i - \int_D \phi(r, 0) dr > 0 \quad i = 1, 2, \dots, N'$$

ya que si  $c'_i < 0$  significa que no es necesario agregar nutrientes a la  $j$ -ésima zona.

- Segundo, para minimizar la función real  $\|Q(t, r_0)\|^2$ , reducimos la búsqueda del sitio  $r_0$  a un dominio más pequeño  $D$ , tal que

$$P(r_0) = \prod_{i=1}^N \int_0^T g_i(r, t) dt > 0.$$

reduciendo de esta manera el esfuerzo computacional. Y en el caso en que  $P(r_0) = 0$  implica que el sitio  $r_0$  no es el adecuado debido a que la dinámica del fluido en  $D$  no es favorable para que el nutriente descargado en el punto  $r_0$  alcance todas las zonas contaminadas durante el intervalo de tiempo  $[T - \tau, T]$ .

Notemos también que el método de remediación esta fuertemente basado en las estimaciones adjuntas, pero también pueden, usarse las estimaciones directas del nutriente en las zonas contaminadas. Estas estimaciones equivalentes se complementan para la estimación de nutrientes y el control de contaminantes. La estimación directa utiliza la solución del problema de transporte y permite hacer un análisis sobre todo un cuerpo de agua ante una situación ecologica. En contraste, las estimaciones adjuntas utilizan las soluciones del problema adjunto y dependen explícitamente de la razón de descarga del nutriente y de la distribución inicial de nutriente en una región. Las soluciones del problema adjunto sirven como funciones de influencia mostrando la contribución de nutrientes sobre una zona contaminada respecto al punto de descarga considerado. Sin embargo las estimaciones adjuntas son efectivas y económicas en el estudio de sensibilidad de las concentraciones de nutriente ante variaciones en los parámetros del modelo.

La técnica del adjunto descrita en este trabajo es muy práctica para estudiar los problemas de control de emisiones industriales, la localización fuentes de emisión de contaminantes que violan las normas sanitarias y también puede ser empleada para la estimación de la intensidad de una fuente de contaminantes conocida su posición. Por ejemplo podemos considerar el caso de un accidente de la planta nuclear o explosión de una bomba nuclear (prueba de un ataque terrorista). En todas estas situaciones la posición de la fuente es

conocida o puede ser fácilmente localizada (por ejemplo desde un satélite). Y la técnica del adjunto puede proporcionar el límite inferior de la intensidad de la fuente, la cual puede ser útil en la determinación de grado de desastre del accidente.

---

## Bibliografía

---

1. Alfonso V. Botello, Susana Villanueva F. y Leonardo García Hernández.: 2007, Los derrames de petróleo en el ambiente marino. Instituto Nacional de Ecología. Boufadel, M.C., Suidan,
2. Boufadel, M.C., Suidan, M.T. and Venosa, A.D.: 2007, Tracer studies in a laboratory beach subjected to waves; J. Env. Engineering 133, 722-732.
3. Cheney, E.W.: 1966, Introduction to Approximation Theory, Chelsea Publishing Company, NY.
4. Cook J, Westlake D (1972) Microbial Utilization of Crude Oil. Appl. Microbiol. 23: 11082- 11089.
5. Coulon, F., McKew, B.A., Osborn, A. M., McGenity, T. J. and Timmis, K. N.: 2006, Effects of temperature and biostimulation on oil-degrading microbial communities in temperate estuarine waters, Env. Microbiology 9, 177-186.
6. Crank, J. and Nicolson, P.: 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.
7. Dymnikov V. P. Dokl. Akad. Nauk 382 (2), 173 (2002) .
8. Hadamard, J.: 1923, Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations, Yale University Press, New Haven, CT.
9. . Jewett S.C., Dean T.A., Woodin B.R., Hoberg M.K., Stegeman J.J.: 2002, Exposure to hydrocarbons 10 years after the Exxon Valdez oil spill: Evidence from cytochrome P4501A expression and biliary FACs in nearshore demersal fishes. Marine Environmental Research, 54 (1), pp. 21-48

10. Kreyszig, E.: 2006, *Advanced Engineering Mathematics*, John Wiley & Sons, NJ.
  11. Lessar R.R. and Demarco G.: 2000, The significance of oil spill dispersants. *Spill Science & Technology Bulletin*, 6(1), 59-68.
  12. Luenberger, D. G.: 1984, *Linear and Non-linear Programming*, Addison Wesley, Reading, MA.
  13. Nedwell, D.B.: 1999, Effect of Low Temperature on Microbial Growth: Lowered Affinity for Substrates Limits Growth at Low Temperature.; *FEMS*; 30, 101-111.
  14. Marchuk, G. I.: 1986, *Mathematical Models in Environmental Problems*, Elsevier, NY.
  15. Marchuk, G. I. and Skiba, Yu.N.: 1976, Numerical calculation of the conjugate problem for a model of the thermal interaction of the atmosphere with the oceans and continents. *Izvestiya, Atmos. Ocean. Physics* 12, 279-284.
  16. Marchuk, G. I.: 2006, *Adjoint Equations and Their Applications*, *Trudy Instituta Matematiki i Mekhaniki UrO RAN*, 2006, Vol. 12, No. 1.
  17. NAS: 1985, *Oil in the sea-inputs, fates, and effects*. National Academy of Sciences, National Academy Press, Washington, DC.
  18. Parra-Guevara D. and Skiba, Yu.N.: 2003, Elements of the mathematical modelling in the control of pollutants emissions. *Ecological Modelling* 167, 263-275.
  19. Parra-Guevara D. and Skiba, Yu.N.: 2006, On optimal solution of an inverse air pollution problem: Theory and numerical approach, *Math. Comp, Modell.* 43, 766-778.
  20. Parra-Guevara D. and Skiba, Yu.N.: 2007, A variational model for the remediation of aquatic systems polluted by biofilms, *Intern. J. Appl. Math.* 20, 1005-1026,2007.
  21. Parra-Guevara D., Skiba, Yu.N. and F. N. Arellano: 2011, Optimal assessment of discharge parameters for bioremediation of oil-polluted aquatic systems, *Intern. J. Appl. Math.* Volume 24, No 5, 731-752.
-

22. Rektorys, K.: 1980, Variational Methods in Mathematics, Science and Engineering, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht.
  23. Skiba, Yu.N.: 1993, Balanced and absolutely stable implicit schemes for the main and adjoint pollutant transport equations in limited area. *Rev. Intern. Contamin. Ambient.* 9, 39-51.
  24. Skiba, Yu.N.: 1996, Dual Oil Concentration Estimates in Ecologically Sensitive Zones. *Env. Monit. Assess.* 43, 139-151.
  25. Skiba, Yu.N.: 1999, Direct and adjoint oil spill estimates, *Env. Monit. Assess.* 59, 95-109.
  26. Skiba, Yu.N. and Davidova-Beltiskaya, V.: 2003, On the Estimation of Impact of Vehicular Emissions. *Ecological Modelling* 166, 169-184.
  27. Skiba, Yu.N. and Parra-Guevara, D.: 1999, Mathematics of Oil Spill: Existence, Uniqueness, and Stability of Solutions, *Geofísica Internacional*, 38 (2), 117-124.
  28. Skiba, Yu.N. and Parra-Guevara, D.: 2000, Industrial Pollution Transport. Part I: Formulation of the Problem and Air Pollution Estimates. *Env. Model. Assess.* 5, 169-175.
  29. Skiba, Yu.N.: 2003, On a Method of Detecting the Industrial Plants Which Violate Prescribed Emission Rates. *Ecological Modelling* 159, 125-132.
  30. Skiba, Yu.N., Parra-Guevara, D. and Belitskaya V. D.: 2005, Air quality assessment and control of emission rates. *Env Monit. Assess.* 111, 89-112.
  31. Smith, D. R.: 1998, Variational Methods in Optimization, Dover Publications, NY.
  32. Strang, G.: 1980, Linear Algebra, Academic Press, NY.
  33. Suni, S., Koskinen, K., Kauppi, S., Hannula, E., Ryyanen, T., Aalto, A., Jaanheimo, J., Ikavalko, J., Romantschuk, M.: 2007, Removal by Sorption and In Situ Biodegradation of Oil Spills Limits Damage to Marine Biota: A Laboratory Simulation, *J. Human Envir.* 36, 173-179.
-

- 
34. Venosa, A.D.: 1998, Oil spill bioremediation on coastal shorelines: a critique. In: S.K. Sikdar and R.I. Irvine (Eds.), *Bioremediation: Principles and Practice*. Vol III. *Bioremediation Technologies*, Technomic, Lancaster, PA, 259-301.
  35. Venosa, A.D., Suidan, M. T., Wrenn, B.A., Strohmeier, K.L., Haines, J.R., Eberhart, B.L., King, D. and Holder, E.: 1996, *Bioremediation of an Experimental Oil Spill on the Shoreline of Delaware Bay*, *Env. Sci. Technol.*
  36. Zhu, X., Venosa, A.D., Suidan, M.T. and Lee, K.: 2001, *Guidelines for the Bioremediation of Marine Shorelines and Freshwater Wetlands*, U.S. Environmental Protection Agency, Cincinnati, OH.
  37. ZoBell, C.E.: 1973, Microbial degradation of oil: Present status, problems, and perspective, pp. 3-16, in: Ahearn and Meyers (Eds.), *The Microbial Degradation of Oil Pollutants*, Publication No. LSU-SG-73-01, Proceeding Center for Wetlands Resource, Louisiana State University, Baton Rouge, LA.
-