



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

**Análisis comparativo entre series de tiempo y
datos espacialmente distribuidos para obtener la
tasa de emisión en un modelo de difusión-reacción:
aplicación de las funciones adjuntas.**

T E S I S

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
ACTUARIO**

**P R E S E N T A:
FRANCISCO JAVIER BUSTAMANTE GARCÍA**



**DIRECTOR DE TESIS:
DR. DAVID PARRA GUEVARA**

Ciudad Universitaria, CD. MX., 2017



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.

1. Datos del alumno
Bustamante
García
Francisco Javier
22 34 93 27
Universidad Nacional Autónoma de
México
Facultad de Ciencias
Actuaría
307111894

2. Datos del tutor
Dr.
David
Parra
Guevara

3. Datos del sinodal 1
Dr.
Carlos
Díaz
Ávalos

4. Datos del sinodal 2
Dr.
Ricardo
Ramírez
Aldana

5. Datos del sinodal 3
Dr.
Tomás
Morales
Acoltzi

6. Datos del sinodal 4
Dr.
Ismael
Pérez
García

7. Datos del trabajo escrito
Análisis comparativo entre series de tiempo y datos espacialmente distribuidos para obtener la tasa de emisión en un modelo de difusión-reacción: aplicación de las funciones adjuntas.
103 páginas
2017

Agradecimientos

Esta Tesis es la culminación de mucho trabajo y esfuerzo, no solo mío, de todas las personas que me ayudaron, regañaron y animaron a culminar esta etapa en mi vida. Es por eso que dedico este trabajo a:

Mis Padres

Gracias a ustedes tengo todo lo que poseo, por ustedes aprendí la importancia de la familia y la responsabilidad que eso conlleva, a ustedes les debo la pasión que tengo por mi carrera, me mostraron como es que el trabajo honrado y constante hace maravillas cuando hay que superarse. Gracias por ser los mejores padres y el mejor ejemplo que tengo de Amor. GRACIAS PAPÁ, GRACIAS MAMÁ, LOS AMO.

Mis Hermanas

Gracias por el apoyo que siempre me han brindado, por su cariño y compañía, porque siempre han sido una inspiración pues cada una tiene cualidades que espero tener. Gracias por estar siempre conmigo y cuidarme, por ser mis cómplices en muchas ocasiones y por consentirme tanto. LAS AMO.

Mi Esposa

Gracias por ser mi mayor inspiración pues desde que te conocí te convertiste en la razón por la que quise ser mejor, gracias por tu amor, por acompañarme todo este tiempo y por darme las alegrías más hermosas de esta vida, TE AMO.

Mis Niños

Ustedes son lo más importante que tengo y para ustedes es toda mi vida y logros, gracias por sus risas, su amor, sus besos, LOS AMO PEQUEÑOS.

Agradecimientos Especiales

Quiero expresar un profundo agradecimiento a la UNAM y al Centro de Ciencias de la Atmósfera por el apoyo otorgado para la realización de mi tesis, así como las enseñanzas que recibí del grupo de *Modelación Matemática de Procesos Atmosféricos*, dirigido por el Dr. Yuri N. Skiba.

En particular,

Agradezco al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT), DGAPA-UNAM, proyecto No. IN103313-2, por la beca que recibí y que me permitió desarrollar gran parte de la tesis que ahora presento. Así mismo, agradezco al programa PAPIIT por aportar los recursos para la compra de la estación de trabajo: WORK STATION DELL PRECISION T7600, No. de Inventario UNAM 2387544, con la cual se realizaron los experimentos numéricos respectivos.

Índice

Objetivos generales	6
Objetivos específicos	6
Resumen.....	7
Capítulo 1 Introducción	9
Capítulo 2 Formulación del problema de regularización y resultados teóricos	15
2.1. Formulación del problema variacional	15
2.2. Resultados teóricos: existencia y unicidad de la solución regularizada	26
Capítulo 3 Modelo de Dispersión	31
3.1 Formulación de un modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos	31
3.2 Unicidad y estabilidad de la solución del modelo de dispersión en el sentido clásico.....	37
3.3 Ecuación de balance de masa.....	41
Capítulo 4 Modelo de dispersión adjunto	44
4.1 Definición del operador adjunto.....	45
4.2 Modelo de dispersión adjunto y estimaciones duales.....	49
4.3 Análisis de sensibilidad de la concentración promedio $I_{\Omega\tau}$	56
Capítulo 5 Modelo unidimensional y ejemplos de la solución del problema inverso	60
5.2 Resultados numéricos para un modelo de dimensión uno: recuperación de $Q(t)$ con series de tiempo	70
5.3 Resultados numéricos para un modelo de dimensión uno: recuperación de $Q(t)$ con datos espacialmente distribuidos	80
Conclusiones	93
Referencias.....	95

Objetivos generales

I. Presentar los fundamentos teóricos de un método inverso, basado en las funciones adjuntas o de influencia, que permita obtener la tasa de emisión no-estacionaria de una fuente puntual con base en datos de la concentración de un contaminante atmosférico.

II. Comparar los resultados del método inverso cuando dos diferentes conjuntos de datos de concentración se utilizan para recuperar la tasa de emisión de una fuente puntual, es decir, series de tiempo en un sitio de observación y datos espacialmente distribuidos a un tiempo fijo.

Objetivos específicos

1. Formular un método inverso (regularización) que permita recuperar la tasa de emisión no-estacionaria de una fuente puntual a partir de diferentes conjuntos de datos de la concentración de contaminantes. Así mismo, formular un modelo general de dispersión y el correspondiente modelo adjunto que completan el método inverso.

2. Delimitar el modelo de dispersión general para definir un modelo de difusión-reacción unidimensional bien formulado. Obtener la solución analítica.

3. Establecer el modelo adjunto correspondiente al modelo de difusión-reacción unidimensional. Obtener la solución analítica.

4. Aplicar la teoría general del método inverso al problema unidimensional para formular el problema variacional cuya solución permita calcular la tasa de emisión de la fuente puntual a través de diferentes conjuntos de datos de concentración.

5. Discretizar el problema variacional para obtener un problema de optimización. La solución de este problema se obtendrá con un esquema numérico (rutina *quadprog* de MATLAB).

6. Utilizar datos sintéticos de la concentración, contruidos a través de la solución analítica del modelo de difusión-reacción y perturbaciones aleatorias, para calcular la solución numérica del problema de optimización.
7. Comparar las soluciones obtenidas en el punto 6 (contra las soluciones analíticas) cuando se utilizan dos tipos de conjuntos de datos de la concentración de un contaminante: series de tiempo en un sitio de observación y datos espacialmente distribuidos a un tiempo fijo.

Resumen

Recuperar la historia de descarga de una fuente contaminante a partir de los datos de la concentración de las sustancias emitidas en una región es un problema inverso que aparece en el estudio de la contaminación en el océano, la atmósfera y el agua subterránea. La solución de este problema es útil en la estimación del impacto ambiental local y regional, y por lo tanto, en la definición de las acciones para proteger a la población asentada en zonas contaminadas. La principal dificultad en este problema inverso es la inestabilidad que surge en el proceso de la recuperación de la tasa de emisión debido a la presencia de errores en los datos de concentración. Tales errores están presentes debido a que el procedimiento de inversión necesita datos de la anomalía de la concentración producida por la fuente puntual, la cual frecuentemente se estima combinando datos de diferente procedencia que contienen errores (salida de modelos de dispersión y datos de instrumentos de medición).

En este trabajo de tesis se presenta un método inverso para estimar la tasa de emisión de una fuente puntual no-estacionaria que emite un contaminante hacia la atmósfera. El método se formula como un problema variacional (regularización), y se prueba la existencia y la unicidad de su solución. Este método se complementa a través de un modelo de dispersión lineal y el correspondiente modelo adjunto. En este trabajo de tesis se describen modelos tridimensionales de este tipo, y se prueba que están bien formulados en el sentido de Hadamard. Se realizan ejemplos numéricos de la estimación de la tasa de emisión (solución del problema inverso) utilizando una versión unidimensional de dichos modelos. El método inverso se puede aplicar tanto para una serie de tiempo de la anomalía de la concentración de un contaminante atmosférico, es decir, datos recabados en una estación de

monitoreo, como para datos de la anomalía de la concentración distribuidos en un dominio a un tiempo fijo. Los resultados del método son diferentes con respecto a estos conjuntos de datos. Se obtiene un buen resultado en la recuperación de la tasa de emisión usando series de tiempo, mientras que se muestra que los datos espacialmente distribuidos no son viables para resolver el problema inverso. Con respecto al problema variacional, se muestra que la minimización de la norma en el espacio L_2 de la primera derivada de la tasa de emisión es una regularización útil para este problema inverso, ya que filtra los errores en los datos de concentración y disminuye la inestabilidad. Tal procedimiento de minimización está sujeto a restricciones integrales (ecuaciones de Fredholm), las cuales contienen información completa, en forma compacta, del proceso de dispersión en la atmósfera. Las funciones adjuntas utilizadas como núcleos en dichas ecuaciones integrales son la clave para exhibir la relación explícita entre la tasa de emisión de la fuente y los datos de la anomalía de la concentración del contaminante. De estas ecuaciones integrales se obtienen expresiones analíticas para calcular la tasa de emisión en dos casos particulares: descarga constante e impulso en el tiempo (explosión). Para resolver el caso de una fuente puntual no-estacionario se establece el problema discreto asociado al problema variacional como un problema de programación cuadrática, y se prueba la existencia y la unicidad de la solución. Dicho problema se resuelve eficientemente con la rutina *quadprog* de MATLAB. Finalmente, utilizando diferentes conjuntos de datos (series de tiempo y datos espacialmente distribuidos), se presentan algunos ejemplos numéricos sintéticos que ilustran el desempeño del método inverso.

Capítulo 1

Introducción

En forma general, los problemas inversos consisten en la determinación de las causas a partir del conocimiento de los efectos en un sistema (Groetsch, 1993). Siendo los efectos los valores observados o requeridos de las variables de estado, y las causas las condiciones iniciales, forzamientos o valores de parámetros que tienen la capacidad de conducir al sistema hasta dicho comportamiento. De esta forma, cada problema inverso corresponde en forma natural a un problema directo, siendo estos últimos aquellos problemas donde para un conjunto de causas conocidas se determinan los efectos en un sistema. Por ejemplo, el pronóstico de los niveles de contaminación en una región cuando son conocidas las fuentes de emisión, la distribución inicial de los contaminantes y las condiciones de dispersión en la atmósfera es un problema directo; mientras que un problema inverso relacionado es la determinación de la distribución de los contaminantes al tiempo $t = 0$ cuando es conocida la concentración de dichas sustancias en varias estaciones de monitoreo para los tiempos $t_k > 0$.

Una característica significativa en esta clasificación es que aun cuando los problemas directos están bien formulados los problemas inversos correspondientes caen frecuentemente en el campo de los problemas mal formulados, es decir, son problemas que presentan diferentes tipos de inestabilidad o no satisfacen la existencia o la unicidad de la solución (Glasko, 1984; Groetsch, 1993). De esta forma, la determinación de una solución en un problema inverso requiere, además del conocimiento del problema directo (sistema), la introducción de métodos capaces de atenuar el proceso de inestabilidad para así poder seleccionar una solución congruente con el fenómeno en estudio. Dichos métodos se conocen

como *Regularizaciones del Problema Inverso* (Glasko, 1984; Groetsch, 1993). Entre tales métodos, destacan aquellos introducidos por Tijonov (Glasko, 1984; Engl, 1995), los cuales consisten en la minimización de una funcional que agrupa el error en los datos, y alguna norma para las variables de control y sus derivadas.

Es importante observar que la modelación inversa (problemas inversos) representa un área de investigación de creciente interés para la comunidad de científicos atmosféricos (Kasibhatla et al., 1999; Granier et al., 2002). Hasta hace algún tiempo, las técnicas de modelación inversa eran usadas en ciencias atmosféricas mayoritariamente en el contexto de problemas de asimilación de datos meteorológicos y pronóstico del tiempo (Gustafsson, 1997). Esto debido a la mayor disponibilidad de observaciones meteorológicas tradicionales (viento, temperatura, humedad, etc.) que de observaciones de trazas atmosféricas como gases y aerosoles. Sin embargo, el advenimiento y creciente desarrollo de la percepción remota de trazas en la atmósfera ha ampliado vigorosamente el uso de este tipo de técnicas y herramientas en química atmosférica (Charlson, 2001). Además, se ha venido usando crecientemente como una técnica de estimación de la sensibilidad respecto de parámetros como son la intensidad de las emisiones y las tasas de sedimentación, así como para la optimización de parámetros en modelos de varias escalas y grados de sofisticación física, matemática y computacional.

Algunos ejemplos de la aplicación de las técnicas inversas en ciencias atmosféricas se resumen a continuación.

1. Análisis objetivo de campos sinópticos con el fin de aminorar el error del pronóstico a partir de un estado inicial pobre e irregularmente determinado u observado (Problema de inicialización). Técnica: Interpolación del campo geopotencial de 500 hPa desde las estaciones de radio sondeo a las mallas del modelo barotrópico usando un polinomio bidimensional e interpolación estadística u óptima (Panofsky, 1949).

2. Ciclo biogeoquímico del dióxido de carbono, estimación de fuentes y sumideros. Técnica: Acotamiento de las estimaciones de los flujos de dióxido de carbono a través de la resolución del problema inverso para un modelo meridional y difusivo (Bolin y Keeling, 1963).
3. Problema de inicialización y problema de sensibilidad a las condiciones de frontera laterales en modelos de área limitada. Técnica: Asimilación variacional de datos en tres y cuatro dimensiones. Esta técnica es similar a la interpolación estadística pero ahora se interpolan simultáneamente todas las variables usando como restricción las relaciones entre ellas expresadas en el modelo que las estima (Bengtsson, 1980).
4. Problema de estimación probabilística del estado futuro del tiempo. Técnica: Predicción de conjuntos ("ensambles"). En esta técnica se resuelve el problema adjunto para estimar sensibilidades máximas y luego se realizan conjuntos de corridas para estudiar la sensibilidad de variables seleccionadas (Molteni et al., 1996).
5. Ciclo biogeoquímico del metano, estimación de fuentes estacionarias. Técnica: Estimación de la distribución óptima de flujos de emisión a partir de las observaciones de la concentración usando prueba y error sobre un conjunto de escenarios consistentes con el error de las observaciones (Fung et al., 1991).
6. Optimización del desempeño de modelos fotoquímicos asimilando observaciones satelitales, determinación de la capacidad oxidativa de la atmósfera y ciclos biogeoquímicos. Técnica: Asimilación variacional de datos (Filtros de Kalman y funciones de Green), método adjunto y procedimientos recursivos y paralelizados (Fisher y Larry, 1995; Enting, 1999; Ménard, 1999).
7. Estimación de fuentes estacionarias radioactivas y respuesta a emergencias nucleares. Técnica: Asimilación variacional de datos y resolución del problema adjunto (Robertson y Langner, 1998; Pudykiewickz, 1998; Seibert, 2001).

8. Estimación de fuentes estacionarias y parámetros de reactividad, diseño de redes de monitoreo y sensibilidad a errores en inventarios de emisiones para modelos fotoquímicos y emergencias nucleares. Técnica: Resolución del problema adjunto, diferenciación automática y asimilación variacional de datos (Elbern et al., 2000; Quélo et al., 2002).

9. Control de emisiones industriales a corto plazo. Técnica: Estimaciones directas y adjuntas de los niveles de contaminación, aplicación del principio de dualidad para establecer restricciones ecológicas y uso de métodos de optimización y cálculo variacional para determinar los factores de amortiguamiento sobre las tasas de emisión. (Parra-Guevara y Skiba, 2003, 2006; Parra-Guevara et al., 2010).

10. Determinación de los parámetros de liberación de limpiadores o bioestimulantes en sistemas acuáticos con fines de remediación. Técnica: Estimaciones directas y adjuntas de la concentración media de limpiadores (bioestimulantes), aplicación del principio de dualidad para establecer restricciones ecológicas y uso de métodos de optimización y cálculo variacional para determinar las tasas de descarga y los sitios óptimos de operación (Parra-Guevara y Skiba, 2007, 2011; Parra-Guevara, et al., 2011).

Entre las aplicaciones antes mencionadas destacan los métodos de modelación inversa basados en el uso de las funciones adjuntas y un principio de dualidad que estima alguna propiedad de las variables de estado. Esta estimación dual usa la solución del modelo de dispersión adjunto como núcleo en una ecuación integral, y tiene la ventaja de exhibir en forma explícita la influencia que las condiciones iniciales y forzamientos tienen sobre las variables de estado del sistema (Marchuk, 1995). Así, tal estimación dual proporciona una técnica efectiva y computacionalmente económica en el estudio de la sensibilidad de los modelos directos respecto de perturbaciones en los parámetros. En general, las estimaciones directa y adjunta son elementos complementarios que permiten comprender los diferentes aspectos de un sistema y analizar problemas de diferente índole. Por ejemplo, durante las últimas décadas se han desarrollado varias aplicaciones de las ecuaciones adjuntas en oceanología (Skiba y Adem, 1995) y meteorología dinámica. A este respecto, Marchuk (1974;

1975) sugirió el uso de las soluciones de las ecuaciones adjuntas para estimar el promedio en espacio y tiempo de la anomalía de campos meteorológicos, y para estudiar la respuesta lineal de los modelos a las variaciones en las condiciones iniciales y el forzamiento. Una de las primeras aplicaciones de estas ideas fue el estudio del modelo lineal global tridimensional de la interacción térmica de la troposfera con los océanos y continentes, donde las soluciones adjuntas fueron construidas por Marchuk y Skiba (1976), y Skiba (1978).

Debido a la ventaja que presenta la introducción de las funciones adjuntas y el principio de dualidad para el estudio de los modelos dinámicos y de dispersión, en el presente trabajo de tesis se considera este método, junto con una regularización del tipo Tjonov, para obtener la solución de un problema inverso en el contexto de la estimación de fuentes contaminantes. En forma específica, el problema a tratar consiste en la recuperación de la tasa de emisión no-estacionaria, de una fuente puntual desconocida, a partir de los datos de concentración en algunos sitios de monitoreo (series de tiempo y/o datos espacialmente distribuidos). La solución de este problema inverso puede ser utilizada para estimar y verificar inventarios de emisiones de diversas sustancias tóxicas de origen químico o biológico (Vautard et al., 2000; Seibert, 1999), así como para detectar la intensidad de fuentes desconocidas de trazas atmosféricas (Lushi and Stockie, 2010). Por ejemplo, la intensidad y localización de pruebas nucleares o eventos relacionados con el terrorismo pueden lograrse usando observaciones de radio núcleos en la atmósfera (Pudykiewicz, 1998; Shankar-Rao, 2007). La solución de este problema inverso también es relevante en la determinación de fuentes de emisión transfronterizas, es decir, la estimación de fuentes contaminantes en países donde la autoridad no tiene la obligación de declarar todo tipo de emisiones (Islam, 1999).

En estudios previos sobre este problema inverso, frecuentemente los autores han considerado la fuente de emisión de tipo estacionario (constante) o definida a través de un impulso en el tiempo (explosión), y los métodos que han desarrollado se apoyan fuertemente en esta característica. Así, tales técnicas no abarcan todos los posibles eventos de emisión, y por lo tanto, sólo se aplican en casos restringidos (Pudykiewicz, 1998; Islam, 1999). Otra limitación consiste en el uso de soluciones analíticas del proceso de dispersión (modelos de

pluma Gaussiana), lo cual restringe la aplicación de dichas técnicas a condiciones de dispersión estacionarias en la atmósfera (Islam, 1999; Kathirgamanathan, et al., 2003).

En este trabajo de tesis, el método de inversión que se desarrolla para recuperar la tasa de emisión aporta algunas mejoras con respecto a las limitaciones antes mencionadas, es decir, se considera que tanto la tasa de emisión de la fuente puntual como el modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos representan procesos no-estacionarios.

Es importante notar que la dificultad esencial de dicho problema consiste en la inestabilidad que surge durante el proceso de inversión de los datos de concentración, es decir, pequeñas perturbaciones en los datos inducen grandes cambios en la tasa de emisión estimada. Tal fenómeno de inestabilidad es inevitable debido a que los datos reales siempre contienen algún tipo de error. Por esta razón, en este trabajo se analiza en detalle una regularización que tiene como objetivo central filtrar dichos errores y atenuar la inestabilidad. Dicha regularización se beneficia fuertemente de la introducción de las funciones adjuntas o de influencia. Al mismo tiempo, se estudia el desempeño de la regularización cuando diferentes conjuntos de datos son utilizados (series de tiempo y datos espacialmente distribuidos). Dicho análisis tiene por objetivo determinar el tipo de información que es más adecuada para lograr una buena recuperación de la tasa de emisión de una fuente desconocida.

El contenido del trabajo es el siguiente. En el capítulo 2 se establece la formulación matemática del problema inverso así como la demostración de la existencia y la unicidad de la solución regularizada. Un modelo de dispersión tridimensional (problema directo) que completa la formulación del problema de inversión de datos se presenta en el capítulo 3, y en el capítulo 4 se describe el modelo adjunto correspondiente. Se prueba que ambos modelos están bien formulados. En el capítulo 5 se presentan ejemplos sintéticos de inversión de datos para un modelo de dispersión de dimensión cero y para la versión unidimensional de los modelos descritos en los capítulos 3 y 4. En dichos ejemplos se utilizan dos tipos de conjuntos de datos sintéticos de la anomalía de la concentración de un contaminante: series de tiempo en un sitio de observación y datos espacialmente distribuidos a un tiempo fijo. Es importante notar que la ventaja de trabajar con tales modelos sencillos consiste en conocer soluciones analíticas para dichos modelos con las cuales se pueda comparar los resultados de los métodos de inversión de datos. También, para efectos de comparación, se utiliza en

todos los ejemplos numéricos la misma tasa de prueba y parámetros similares. Los resultados numéricos que se muestran en el capítulo 5 son típicos.

Capítulo 2

Formulación del problema de regularización y resultados teóricos

En este capítulo se establecen ecuaciones integrales que relacionan los datos de concentración con la tasa de emisión de una fuente puntual y se formula un problema variacional cuya solución es la tasa de emisión de dicha fuente que se recupera a partir de los datos de la concentración del contaminante. En dicho problema, el funcional objetivo se elige con el fin de filtrar los errores en los datos de la anomalía de la concentración del contaminante, y las restricciones son ecuaciones integrales de Fredholm que resumen el proceso de dispersión de dicha sustancia en la atmósfera. Tales ecuaciones relacionan la anomalía de la concentración del contaminante con los parámetros de la fuente desconocida (tasa y sitio de la emisión), al mismo tiempo, el núcleo de estas ecuaciones integrales está determinado por las funciones adjuntas. Este problema variacional se conoce como *problema de regularización* y su solución es llamada la *solución regularizada del problema inverso* (Groetsch, 1993). La necesidad de introducir dicho problema de regularización se motiva con el análisis de estabilidad de un modelo sencillo de dispersión de dimensión cero. Al final del capítulo se da una prueba de la existencia y la unicidad de la solución regularizada.

2.1. Formulación del problema variacional

Se procede aquí de acuerdo a la teoría desarrollada por Parra-Guevara y Skiba (2013a, 2015 y 2016). Supongamos que durante el intervalo de tiempo $(0, T)$ un evento singular, tal como una explosión o la descarga de una sustancia peligrosa, ha tenido lugar en el sitio \mathbf{r}_0 localizado en una región \mathbf{D} . La tasa de emisión $Q(t)$ de esta fuente desconocida es la *variable de control* que se desea determinar. Asumamos también que la distribución espacial $\varphi^0(\mathbf{r})$ de este contaminante al tiempo inicial $t = 0$ ha sido establecida, y que las emisiones de dicha sustancia desde otras fuentes $f(\mathbf{r}, t)$, ubicadas en la región \mathbf{D} , son conocidas en todo tiempo $t > 0$. De esta forma, el modelo general de dispersión lineal para la concentración φ de este contaminante en el intervalo de tiempo $(0, T)$ puede ser escrito como sigue:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + A\varphi = f(\mathbf{r}, t) + Q(t)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \text{ en } \mathbf{D} \times (0, T) \quad (2.1)$$

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

En la ecuación (2.1), el operador lineal A describe procesos físicos tales como la advección debida al viento, la difusión turbulenta y la sedimentación, así como la transformación de los contaminantes debida a reacciones químicas. También en (2.1), $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ representa la función delta de Dirac centrada en el punto \mathbf{r}_0 . El modelo (2.1)-(2.2) define el *problema directo* que corresponde al problema inverso de la recuperación de la tasa de emisión de una fuente puntual. Se asume que este modelo está bien formulado (Samarskii y Vabishchevich, 2007), es decir, que la solución φ existe, es única, y presenta pequeños cambios con respecto a pequeñas perturbaciones en la condición inicial y el forzamiento. En el capítulo 3 se presenta un modelo de dispersión tridimensional con esta característica.

Por otra parte, denotemos por $\widehat{\varphi}$ la solución del modelo de dispersión (2.1)-(2.2) sólo con el forzamiento $f(\mathbf{r}, t)$, es decir, $Q(t) \equiv 0$. Así, la anomalía de la concentración del contaminante o *variable de estado* ϕ ($\phi = \varphi - \widehat{\varphi}$), satisface el modelo de dispersión siguiente:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + A\phi = Q(t)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad \text{en } \mathbf{D} \times (0, T) \quad (2.3)$$

$$\phi(\mathbf{r}, 0) = 0 \quad \text{en } \mathbf{D} \quad (2.4)$$

Es importante notar que la concentración (principal) del contaminante $\widehat{\varphi}$ es una solución conocida del modelo de dispersión, la cual está determinada a través de la distribución inicial $\varphi^0(\mathbf{r})$ de dicha sustancia, y el forzamiento $f(\mathbf{r}, t)$. Además, la concentración (total) φ puede ser evaluada parcialmente por medio de monitoreo en algunos sitios dentro de la región \mathbf{D} . Por lo tanto, los datos de la anomalía de la concentración del contaminante ϕ , para diferentes sitios de monitoreo, pueden ser calculados a través de la diferencia $\phi = \varphi - \widehat{\varphi}$. Con dichos datos se pueden formar series de tiempo o datos espacialmente distribuidos a un tiempo fijo. Es razonable esperar que los errores en los datos de la concentración φ sean pequeños, ya que estos están asociados al instrumento de medición, sin embargo, los errores en la concentración principal $\widehat{\varphi}$ son en general mayores, ya que tal función es la salida de un modelo computacional que realiza el pronóstico a partir de los datos de la concentración inicial y de las emisiones contaminantes los cuales contienen errores. De esta forma, se espera que los errores en los datos de la anomalía, obtenidos para diferentes sitios de monitoreo a través de la diferencia $\varphi - \widehat{\varphi}$, sean de magnitud similar a los contenidos en la función $\widehat{\varphi}$. Estas perturbaciones en la anomalía de la concentración del contaminante son el origen de la inestabilidad en el proceso de la recuperación de la tasa de emisión, y la razón fundamental por la que es necesario introducir un método de regularización. Para este fin, es necesario primero establecer una relación directa, generalmente a través de una ecuación integral, entre las variables de control (causas) y las variables de estado (efectos) en el sistema.

Con el objetivo de encontrar tal relación explícita entre la anomalía ϕ (variable de estado) y la tasa de emisión $Q(t)$ (variable de control), se introduce la función adjunta o de influencia g como la solución del modelo adjunto de dispersión.

$$-\frac{\partial g}{\partial t} + A^* g = p(\mathbf{r}, t) \text{ en } \mathbf{D} \times (0, T) \quad (2.5)$$

$$g(\mathbf{r}, T) = 0 \text{ en } \mathbf{D} \quad (2.6)$$

En la ecuación (2.5), el operador adjunto A^* se define a través de la identidad de LaGrange (Marchuk, 1986):

$$(A\phi, g) = (\phi, A^* g) \quad (2.7)$$

donde $(h, g) = \int_{\mathbf{D}} h g d\mathbf{r}$ es el producto interior en el espacio de Hilbert $L_2(\mathbf{D})$. Se asume aquí que el modelo (2.5)-(2.6) es un problema bien formulado. En el capítulo 4 se presenta un modelo adjunto con esta característica.

Multiplicando la ecuación (2.3) por g y tomando la integral sobre $\mathbf{D} \times (0, T)$ se obtiene

$$\int_0^T \int_{\mathbf{D}} g \frac{\partial \phi}{\partial t} d\mathbf{r} dt + \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g A \phi d\mathbf{r} dt = \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g Q(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) d\mathbf{r} dt \quad (2.8)$$

La integración por partes (respecto la variable t) en la primera expresión integral y el uso de las condiciones (2.4) y (2.6) conducen a la igualdad

$$\int_0^T \int_{\mathbf{D}} g \frac{\partial \phi}{\partial t} d\mathbf{r} dt = \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \phi \left\{ -\frac{\partial g}{\partial t} \right\} d\mathbf{r} dt$$

Aplicando en la segunda expresión integral de la ecuación (2.8) la identidad de LaGrange (2.7), y usando en la tercera integral la propiedad de filtrado de la delta de Dirac

$$\int_{\mathbf{D}} g(\mathbf{r}, t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) d\mathbf{r} = g(\mathbf{r}_0, t)$$

se obtiene

$$\int_0^T \int_{\mathbf{D}} \phi \left\{ -\frac{\partial g}{\partial t} + A^* g \right\} d\mathbf{r} dt = \int_0^T Q(t) g(\mathbf{r}_0, t) dt$$

Finalmente la ecuación (2.5) conduce a

$$\int_0^T \int_{\mathbf{D}} \phi p(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt = \int_0^T Q(t) g(\mathbf{r}_0, t) dt \quad (2.9)$$

Si el forzamiento $p(\mathbf{r}, t)$ en (2.5) se define para el punto \mathbf{r}_i en \mathbf{D} como

$$p(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \delta(t - T) \quad (2.10)$$

entonces la ecuación (2.9) conduce a la igualdad

$$\phi(\mathbf{r}_i, T) = \int_0^T Q(t) g_i(\mathbf{r}_0, t) dt \quad (2.11)$$

La ecuación (2.11) establece la relación explícita entre la tasa de emisión $Q(t)$ y la anomalía de la concentración del contaminante en los sitios de monitoreo \mathbf{r}_i , $i = 1, \dots, N$, al momento $t = T$.

Es importante observar que cada solución adjunta g_i del modelo (2.5)-(2.6) con forzamiento definido por la ecuación (2.10) depende sólo de las condiciones de dispersión en la atmósfera y del sitio de monitoreo \mathbf{r}_i , pero es independiente de la variable de control $Q(t)$. De esta forma,

la aplicación de las ecuaciones definidas por (2.11) requiere calcular N funciones adjuntas diferentes.

Por otra parte, si el forzamiento $p(\mathbf{r}, t)$ en la ecuación (2.5) se define para un sitio fijo \mathbf{R} en \mathbf{D} y un tiempo t_j como

$$p(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})\delta(t - t_j) \quad (2.12)$$

entonces la ecuación (2.9) conduce al siguiente conjunto de ecuaciones alternativas a (2.11)

$$\phi(\mathbf{R}, t_j) = \int_0^T Q(t) g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \quad (2.13)$$

donde $\{\phi(\mathbf{R}, t_j)\}_{j=1}^M$ es la serie de tiempo (de valores exactos) para la anomalía de la concentración del contaminante en el sitio de monitoreo \mathbf{R} e instantes de muestreo $t_j \leq T$ ($j = 1, \dots, M$). Se afirma que la ecuación (2.13) relaciona exclusivamente valores exactos porque las soluciones adjuntas no contienen errores debido a los datos iniciales de concentración o de las emisiones.

De forma similar al caso anterior, en la ecuación (2.13) cada función adjunta g_j depende sólo de las condiciones de dispersión en la atmósfera, del sitio de monitoreo \mathbf{R} y del instante t_j , pero es independiente de la variable de control $Q(t)$. Así que, en principio, es necesario calcular M funciones adjuntas para utilizar las ecuaciones dadas por (2.13), sin embargo, tal requerimiento se puede relajar para algunos casos como se explica a continuación.

Primero, hay que notar que de acuerdo al modelo adjunto (2.5)-(2.6) y el forzamiento dado por (2.12) se tiene que

$$g_j(\mathbf{r}_0, t) = 0 \text{ en } (t_j, T)$$

y por lo tanto, la ecuación (2.13) se reduce a la forma

$$\phi(\mathbf{R}, t_j) = \int_0^{t_j} Q(t) g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \quad (2.14)$$

Ahora, en el caso de condiciones de dispersión estacionarias en la atmósfera, los coeficientes de los operadores A y A^* son independientes del tiempo, y la siguiente identidad de cumple

$$g_j(\mathbf{r}_0, t) = g_\alpha(\mathbf{r}_0, T - t_j + t) \text{ en } (0, t_j) \quad (2.15)$$

donde la función adjunta g_α , conocida como *núcleo básico*, es la solución del modelo adjunto (2.5)-(2.6) con forzamiento $p(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})\delta(t - T)$. Para mostrar este resultado hay que notar que, por sustitución directa, la función $g_\alpha(\mathbf{r}, T - t_j + t)$, $0 \leq t \leq t_j$, satisface el problema (2.5)-(2.6) con forzamiento (2.12), y ya que el modelo (2.5)-(2.6) está bien formulado, es decir, se satisface la unicidad de la solución, entonces se tiene que $g_j(\mathbf{r}, t) = g_\alpha(\mathbf{r}, T - t_j + t)$ en $(0, t_j)$.

. En particular, si $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$ se obtiene la ecuación (2.15).

De esta forma, tomando en cuenta el resultado (2.15), la ecuación (2.14) se reescribe como

$$\phi(\mathbf{R}, t_j) = \int_0^{t_j} Q(t) g_\alpha(\mathbf{r}_0, T - t_j + t) dt \quad (2.16)$$

La ecuación (2.16) es un resultado importante para el caso de condiciones de dispersión estacionarias en la atmósfera, ya que establece que la relación explícita entre la variable de control $Q(t)$ y la serie de tiempo para la anomalía de la concentración del contaminante

$\{\phi(\mathbf{R}, t_j)\}_{j=1}^M$ se logra a través de una sola función adjunta, el núcleo básico g_α . La ventaja computacional en este caso particular es inmediata.

Es importante notar que la aplicación de las ecuaciones (2.11) o (2.13)-(2.14) depende del tipo de información disponible. La ecuación (2.11) es útil en el caso de contar con varias

estaciones de monitoreo que registran la concentración del contaminante al mismo tiempo en la región \mathbf{D} . En contraste, las ecuaciones (2.13) o (2.14) pueden ser aplicadas considerando una sola estación de monitoreo en la región la cual registra la concentración del contaminante en instantes sucesivos (serie de tiempo).

Inestabilidad en el problema inverso. La ecuación (2.14) es una ecuación integral de Fredholm (Groetsch, 1993), que relaciona explícitamente los datos de concentración con la variable por determinar. Sin embargo, tal relación, o su equivalente implícito dado por el problema (2.3)-(2.4), no es suficiente para recuperar la tasa de emisión $Q(t)$. Esto se debe a la inestabilidad que surge por la presencia de errores en los datos. Para mostrar esto, consideramos un modelo de dispersión de dimensión cero o modelo de caja. Se asume que la anomalía de la concentración del contaminante ϕ se describe por las siguientes ecuaciones (Parra-Guevara y Skiba, 2003).

$$\frac{d\phi}{dt} + \left(\sigma + \frac{1}{V} u a^2\right) \phi = \frac{1}{V} Q(t), \quad 0 < t < T \quad (2.17)$$

$$\phi(0) = 0 \quad (2.18)$$

Aquí se supone que, en todo momento, el contaminante forma una mezcla homogénea con el aire en la región $\mathbf{D} = [0, a] \times [0, a] \times [0, a]$, la cual es un cubo con arista de longitud a y volumen $V = a^3$. La velocidad del viento u se asume de tipo estacionario, con dirección perpendicular a una pared vertical de la caja. Finalmente, σ denota el coeficiente de transformación química del contaminante. Con estas simplificaciones, la ecuación (2.17) es un caso particular de la ecuación de balance de masa del modelo de dispersión que se presenta en el capítulo 3, para un sólo contaminante, sin sedimentación y considerando una fuente puntual en la región \mathbf{D} con tasa de emisión $Q(t)$.

Por medio de la transformada de Laplace (Dyke, 2004), la solución ϕ del modelo (2.17)-(2.18) se puede expresar a través de la siguiente ecuación integral:

$$\phi(t) = \frac{1}{V} \int_0^t Q(\xi) e^{-r(t-\xi)} d\xi, \quad 0 < t < T \quad (2.19)$$

donde $r = \sigma + \frac{1}{V} u a^2$. Hay que notar que la ecuación (2.19) es equivalente a la ecuación general (2.14), siendo la función exponencial $e^{-r(t-\xi)}$ la función adjunta que corresponde al momento t .

Si consideramos que la concentración del contaminante que se monitorea es $\phi(t) + \delta\phi(t)$, donde $\delta\phi(t)$ es una pequeña perturbación, entonces la solución de (2.19) que corresponde a estos datos es $Q(t) + \delta Q(t)$, donde $\delta Q(t)$ es la respectiva perturbación de la tasa de emisión. Por linealidad en la ecuación integral (2.19), dichas perturbaciones satisfacen la ecuación

$$\delta\phi(t) = \frac{1}{V} \int_0^t \delta Q(\xi) e^{-r(t-\xi)} d\xi, \quad 0 < t < T$$

Derivando respecto del tiempo en ambos lados de esta ecuación, y agrupando términos, se obtiene

$$\delta Q(t) = V \{ \delta' \phi(t) + r \delta \phi(t) \} \quad (2.20)$$

Ahora se considera que la perturbación tiene la forma $\delta\phi(t) = \varepsilon \text{sen}(4k\pi t/T)$, donde $\varepsilon > 0$ es la amplitud de la perturbación ($\varepsilon \ll 1$), y la frecuencia k es un número entero positivo. Sustituyendo $\delta\phi(t)$ en la ecuación (2.20) se obtiene lo siguiente:

$$\delta Q(t) = \varepsilon V \left\{ \frac{4k\pi}{T} \cos\left(\frac{4k\pi t}{T}\right) + r \text{sen}\left(\frac{4k\pi t}{T}\right) \right\} \quad (2.21)$$

Observamos ahora que si $t = T/2$ en (2.21) entonces se tiene que

$$\delta Q\left(\frac{T}{2}\right) = \varepsilon V \frac{4k\pi}{T} \cos(2k\pi) = \varepsilon V \frac{4k\pi}{T}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Y por lo tanto, $\delta Q(T/2) \rightarrow \infty$ cuando $k \rightarrow \infty$. Esto significa que, aún para perturbaciones de pequeña amplitud en los datos ($\varepsilon \ll 1$), la perturbación en la tasa de emisión recuperada $\delta Q(t)$ es arbitrariamente grande cuando la frecuencia de la perturbación de los datos se incrementa. El mismo resultado se obtiene cuando se consideran otro tipo de perturbaciones $\delta\phi(t)$ que tienen derivada grande. Esto prueba que el problema inverso es inestable.

En forma alternativa, es posible obtener la siguiente estimación de (2.21):

$$|\delta Q(t)| \leq \varepsilon V \left\{ \frac{4k\pi}{T} + r \right\}, \quad 0 \leq t \leq T, \quad k = 1, 2, \dots$$

o también

$$|\delta Q(t)| \leq C\varepsilon k, \quad 0 \leq t \leq T, \quad k \geq k_0$$

para una constante $C > 0$ y un valor k_0 suficientemente grande. Esto indica que la perturbación en la tasa de emisión recuperada $\delta Q(t)$ es proporcional al producto de la amplitud y la frecuencia de la perturbación en los datos de la concentración de la anomalía. Ya que el incremento en la frecuencia k puede empeorar la estimación de la tasa de emisión, esto debería prevenir el intento de recuperar dicha función sólo con el incremento de más datos de concentración en el intervalo de tiempo $(0, T)$, es decir, incrementando la frecuencia de muestreo. De esta forma se concluye que es necesario introducir una regularización para el problema de inversión de datos.

Problema de regularización. Considerando los resultados y notas anteriores, el método de regularización (problema variacional) que se propone para resolver el problema inverso,

y establecer la tasa de emisión no-estacionaria $Q(t)$ de una fuente puntual desconocida, es el siguiente:

$$\text{minimizar } J(q) = \frac{1}{2} \int_0^T \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 dt \quad (2.22)$$

$$\text{sueto a: } -\varepsilon \leq \phi_j - \int_0^{t_j} q(t) g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \leq \varepsilon, \quad j = 1, \dots, M \quad \text{y} \quad (2.23)$$

$$q(t) \geq 0, \quad 0 \leq t \leq T \quad (2.24)$$

El funcional dado por (2.22) se minimiza para filtrar las perturbaciones de derivada grande o alta frecuencia contenidas en la anomalía de la concentración del contaminante. La solución del problema (2.22)-(2.24) es la *solución regularizada* del problema inverso. Hay que notar que al trabajar con series de tiempo reales no es posible usar directamente la ecuación (2.14) debido a los errores en la anomalía, por tal motivo se considera la diferencia de términos en (2.23), donde los valores ϕ_j representan los datos que contienen error y que han sido monitoreados en el sitio \mathbf{R} :

$$\phi_j = \phi(\mathbf{R}, t_j) + \delta\phi_j, \quad j = 1, 2, \dots, M$$

y $\delta\phi_j$ denota el error respectivo. Asimismo, la restricciones (2.23) son de la forma $|\delta\phi_j| \leq \varepsilon$, $j = 1, \dots, M$. El parámetro positivo ε (*parámetro de regularización*) tiene la función de ampliar el espacio factible del problema variacional (2.22)-(2.24), y así encontrar una solución del problema inverso. Como se explica en los ejemplos del capítulo 5, tal parámetro influye en la suavidad de la solución obtenida, y su valor óptimo es el error máximo en los datos de la anomalía de la concentración.

Un problema variacional alternativo se puede establecer al usar la ecuación (2.11) en la restricción (2.23) junto con los datos de la concentración de la anomalía espacialmente distribuidos a un tiempo fijo. Note que en ambos problemas variacionales tanto la función objetivo como las restricciones dependen directamente de la variable de control q , por lo

tanto, la versión discreta de dichos problemas son problemas sencillos de programación cuadrática. Tales problemas se establecen en el capítulo 5 y su solución numérica se calcula con la rutina *quadprog* de MATLAB. En la siguiente sección se muestra la existencia y la unicidad de la solución del problema de regularización (2.22)-(2.24). Dado que la estructura del modelo variacional que usa datos espacialmente distribuidos es similar, las demostraciones también valen para este caso. Los modelos de dispersión y su adjunto que completan la formulación general del problema inverso se describen en los capítulos 3 y 4, respectivamente.

2.2. Resultados teóricos: existencia y unicidad de la solución regularizada

De acuerdo a la teoría desarrollada por Parra-Guevara y Skiba (2015), se considera aquí el espacio de Hilbert H de funciones con valores reales y absolutamente continuas en el intervalo $[0, T]$, tales que $q(0) = q(T) = 0$, y $q'(t) \equiv \partial q / \partial t$ es una función cuyo cuadrado es integrable (Riesz & Sz.-Nagy 1990). El producto interior y la norma en el espacio H están definidos como sigue:

$$\begin{aligned} (p, q)_H &= \int_0^T p'(t)q'(t)dt, \\ \|q\|_H &= \sqrt{(q, q)_H} = \sqrt{\int_0^T [q'(t)]^2 dt} \end{aligned} \tag{2.25}$$

Además, se supone que la tasa de emisión desconocida $Q(t)$ es una función de valores no negativos de clase $C^1[0, T]$ que satisface la condición $Q(0) = Q(T) = 0$. Así, Q es una función en el espacio de Hilbert H .

El espacio factible para el problema variacional (2.22)-(2.24) está definido como

$$F_\varepsilon = \left\{ q \in H : q(t) \geq 0 \text{ en } [0, T] \text{ y } -\varepsilon \leq \phi_j - \int_0^{t_j} q(t) g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \leq \varepsilon, \quad j = 1, \dots, M \right\} \quad (2.26)$$

donde $\varepsilon \geq \varepsilon^* = \max_j |\delta\phi_j|$. Note que, debido a la ecuación (2.14), $Q \in F_\varepsilon$ para todo $\varepsilon \geq \varepsilon^*$, y por lo tanto, el espacio factible F_ε es un conjunto no vacío en el espacio H .

Se demuestran ahora algunos lemas que caracterizan el espacio factible (2.26), y se cita un teorema de *distancia mínima* sobre el cual se construye la prueba de la existencia y la unicidad de la solución regularizada del problema inverso.

Teorema 2.1. (Cheney 1966). *Un conjunto no vacío, cerrado y convexo en un espacio de Banach uniformemente convexo posee un único punto que es más cercano a un punto dado.*

Lema 2.1. (Cheney 1966). *El espacio de funciones H es un espacio de Banach uniformemente convexo.*

Lema 2.2. *El espacio factible F_ε es un conjunto convexo en H .*

Demostración. En efecto, sean $q_1, q_2 \in F_\varepsilon$ y $\lambda \in (0, 1)$. Entonces $\lambda q_1 + (1-\lambda)q_2 \in H$, y $\lambda q_1 + (1-\lambda)q_2 \geq 0$ en $[0, T]$.

Por otra parte, para $j = 1, \dots, M$ se tiene que

$$\begin{aligned} & \left| \phi_j - \int_0^{t_j} [\lambda q_1(t) + (1-\lambda)q_2(t)] g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \right| \\ & \leq \lambda \left| \phi_j - \int_0^{t_j} q_1(t) g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \right| + (1-\lambda) \left| \phi_j - \int_0^{t_j} q_2(t) g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \right| \leq \lambda \varepsilon + (1-\lambda)\varepsilon = \varepsilon \end{aligned}$$

Así, $\lambda q_1 + (1-\lambda)q_2 \in F_\varepsilon$ y F_ε es convexo.

Lema 2.3. *Toda sucesión de funciones en H que sea convergente en la norma de dicho espacio es una sucesión que converge uniformemente en $[0, T]$.*

Demostración. Sea $q(t)$ una función en el espacio H . Entonces

$$2|q(t)| = \left| \int_0^t q'(\tau) d\tau - \int_t^T q'(\tau) d\tau \right| = \left| \int_0^t \operatorname{sgn}(t-\tau) q'(\tau) d\tau + \int_t^T \operatorname{sgn}(t-\tau) q'(\tau) d\tau \right| = \left| \int_0^T \operatorname{sgn}(t-\tau) q'(\tau) d\tau \right|$$

donde $t \in [0, T]$, y la función *signo* se define como sigue: $\operatorname{sgn}(t-\tau) = 1$ si $\tau < t$ y $\operatorname{sgn}(t-\tau) = -1$ si $\tau > t$. Por lo tanto, de la última ecuación se obtiene que

$$2|q(t)| \leq \sqrt{\int_0^T [\operatorname{sgn}(t-\tau)]^2 d\tau} \|q\|_H = \sqrt{T} \|q\|_H \quad (2.27)$$

lo cual es consecuencia de la desigualdad de Schwarz (Kreyszig, 1989). Así, toda sucesión convergente en H es uniformemente convergente en el intervalo $[0, T]$.

Lema 2.4. *El espacio factible \mathbf{F}_ε es un conjunto cerrado en H .*

Demostración. Se prueba que $\overline{\mathbf{F}_\varepsilon} \subset \mathbf{F}_\varepsilon$. Sea $q \in \overline{\mathbf{F}_\varepsilon}$. Entonces, existe una sucesión de funciones $\{q_n\}_{n=1}^\infty$ en \mathbf{F}_ε tal que $\|q_n - q\|_H \rightarrow 0$ cuando $n \rightarrow \infty$, y por el lema 2.3, la sucesión $\{q_n\}_{n=1}^\infty$ converge hacia la función q uniformemente. Además,

$$\left| \phi_j - \int_0^{t_j} q(t) g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \right| = \left| \phi_j - \int_0^T q(t) g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \right| \leq \left| \phi_j - \int_0^T q_n(t) g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \right| + \int_0^T |q(t) - q_n(t)| g_j(\mathbf{r}_0, t) dt$$

Sea $C = \max_j \int_0^T g_j(\mathbf{r}_0, t) dt < \infty$. La aplicación de las restricciones (2.23) y la desigualdad (2.27) en la última estimación conduce a

$$\left| \phi_j - \int_0^{t_j} q(t) g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \right| \leq \varepsilon + 0.5\sqrt{T} \|q - q_n\|_H \int_0^T g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \leq \varepsilon + 0.5\sqrt{TC} \|q - q_n\|_H$$

y por lo tanto $\left| \phi_j - \int_0^{t_j} q(t) g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \right| \leq \varepsilon$ en el límite cuando $n \rightarrow \infty$. Así, todas las restricciones integrales en (2.26) se satisfacen.

Para demostrar que $q(t) \geq 0$ se procede por contradicción. Sea $t_0 \in (0, T)$ tal que $q(t_0) < 0$. Ya que la sucesión $\{q_n\}_{n=1}^{\infty}$ es uniformemente convergente en $[0, T]$, $|q_n(t_0) - q(t_0)| \rightarrow 0$ cuando $n \rightarrow \infty$, por lo que existe un subíndice N tal que $|q_N(t_0) - q(t_0)| < |q(t_0)|/2$. Esto implica que $q_N(t_0) < q(t_0)/2 < 0$, lo cual contradice en hecho de que $q_N \in \mathbf{F}_\varepsilon$. Por lo tanto $q \in \mathbf{F}_\varepsilon$. El lema está demostrado.

Evidentemente, la función cero $q_c(t) \equiv 0$ es la única función constante en H , además, $q_c(t) \notin \mathbf{F}_\varepsilon$ (ver el siguiente lema). Por lo tanto, la solución regularizada del problema inverso Q_ε es diferente de $q_c(t)$ o alguna función constante.

Lema 2.5. *Si existe un subíndice K para el cual $\phi_K > \varepsilon^* = \max_j |\delta\phi_j|$, entonces $q_c \notin \mathbf{F}_\varepsilon$ para cualquier valor del parámetro ε tal que $\varepsilon^* \leq \varepsilon < \phi_K$.*

Demostración. Se procede por contradicción. Sea $q_c \in \mathbf{F}_\varepsilon$. Entonces, de la K -ésima restricción integral en (2.23) se obtiene

$$\phi_K - \int_0^{t_K} q_c g_K(\mathbf{r}_0, t) dt \leq \varepsilon$$

es decir, $\phi_K \leq \varepsilon$ lo cual contradice la desigualdad $\varepsilon < \phi_K$, y por lo tanto $q_c \notin \mathbf{F}_\varepsilon$.

Hay que notar que la condición $\phi_K > \varepsilon^*$ es bastante razonable, ya que indica que hay valores de la anomalía $\phi(\mathbf{R}, t_j)$ que son más significativos que los errores en los datos.

Teorema 2.2. *Supongamos que existe un subíndice K tal que $\phi_K > \varepsilon^* = \max_j |\delta\phi_j|$. Entonces, el problema variacional (2.22)-(2.24) tiene solamente una solución no trivial para cada valor del parámetro ε tal que $\varepsilon^* \leq \varepsilon < \phi_K$.*

Demostración. Por el lema 2.1, H es un espacio de Banach uniformemente convexo, y debido a (2.14), $Q \in F_\varepsilon$ para todo $\varepsilon \geq \varepsilon^*$, es decir, F_ε es un conjunto no vacío. Además, por los lemas 2.2 y 2.4, el espacio factible F_ε es un conjunto cerrado y convexo en H .

Por otra parte, $q_c \notin F_\varepsilon$ ya que $\varepsilon < \phi_K$. Por lo tanto, se sigue del teorema 2.1 que existe solamente una función Q_ε en el espacio factible F_ε que minimiza la distancia a la función q_c . Debido a (2.22), la función Q_ε también minimiza el funcional $J(q)$ sobre el espacio factible F_ε . En consecuencia, Q_ε es la solución regularizada del problema inverso.

Como ha sido explicado, la solución regularizada Q_ε no puede ser una función constante, además, debido a la hipótesis de suavidad en la formulación del problema, dicha función no puede representar un impulso en el tiempo (explosión). Sin embargo, para tales casos particulares, que son muy importantes, la intensidad de la fuente puntual $Q(t)$ puede ser estimada directamente de la ecuación (2.14). En el primer caso, cuando el valor promedio de los errores $\delta\phi_j$ es igual a cero y $Q(t) = Q_c = \text{const}$, se procede como sigue. Sumando las relaciones (2.14) sobre j desde 1 hasta M se obtiene:

$$Q_c = \left(\sum_{j=1}^M \phi_j \right) \left(\sum_{j=1}^M \int_0^{t_j} g_j(\mathbf{r}_0, t) dt \right)^{-1} \quad (2.28)$$

donde ϕ_j es la anomalía de la concentración del contaminante registrada al momento t_j y $\phi(\mathbf{R}, t_j) = \phi_j - \delta\phi_j$, $1 \leq j \leq M$. En el segundo caso, cuando el valor promedio de los errores $\delta\phi_j$ es igual a cero, y la intensidad de la fuente es un impulso en el tiempo $t = t_e$: $Q(t) = Q_e \delta(t - t_e)$, $0 < t_e < T$, entonces, también al sumar las relaciones (2.14) sobre j se obtiene:

$$Q_e = \left(\sum_{j=1}^M \phi_j \right) \left(\sum_{j=1}^M g_j(\mathbf{r}_0, t_e) \right)^{-1} \quad (2.29)$$

Capítulo 3

Modelo de dispersión

De acuerdo a la teoría desarrollada en el capítulo 2, a fin de recuperar la tasa de emisión de una fuente puntual, a través de datos de la concentración de un contaminante, es necesario contar con un adecuado modelo de dispersión de sustancias en la atmósfera. Tal modelo debe estar bien formulado en el sentido matemático, es decir, la solución debe ser única y tiene que depender continuamente de las condiciones iniciales, de las condiciones de frontera y del forzamiento (Samarskii y Vabishchevich, 2007). Aun para modelos simplificados en una región limitada no es trivial lograr que éstos estén bien formulados, ya que en general, el flujo de los contaminantes a través de la frontera abierta no es un proceso bien conocido, y por lo tanto, erróneas condiciones de borde puede generar una perturbación que se propague dentro del dominio por advección y difusión que finalmente destruya la solución del modelo. Por lo tanto, es de gran importancia colocar condiciones de frontera que determinen un modelo bien formulado en el sentido matemático y que sean consistentes con el fenómeno físico.

En este capítulo se define un modelo de tipo Euleriano (Seinfeld y Pandis, 1998) para simular la dispersión de sustancias en la atmósfera. Se muestra que, con las condiciones de frontera impuestas, la solución es única y estable respecto de perturbaciones en las condiciones iniciales (distribución inicial de los contaminantes) y del forzamiento (tasas de emisión).

Además, se establece una ecuación de balance de masa que es consistente con el fenómeno de dispersión.

3.1 Formulación de un modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos

Una sustancia contaminante contenida en el medio atmosférico se encuentra sujeta a diversos procesos físicos y químicos que influyen en su propagación y transformación. Algunos de estos procesos son: transporte por advección, sedimentación, difusión turbulenta y transformación por diversas reacciones químicas, además, debido a la complejidad de dichos procesos, la dispersión de cada sustancia que ha sido emitida a la atmósfera por fuentes fijas o móviles es un fenómeno tridimensional y no-estacionario. En lo que sigue se formula un modelo lineal que toma en cuenta estos procesos, y se supone que todos los coeficientes contenidos en las parametrizaciones respectivas son conocidos.

Sea $\mathbf{D} = D \times (0, H)$ un dominio acotado tridimensional (conexo y simplemente conexo) con frontera abierta $\partial\mathbf{D} = \mathcal{S}_0 \cup \mathcal{S} \cup \mathcal{S}_H$, la cual es la unión de la superficie lateral cilíndrica \mathcal{S} , la base o fondo \mathcal{S}_0 y la cubierta \mathcal{S}_H en $z = H$ (ver Fig. 3.1). Se denota por $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i) \in \mathbf{D}$, $i = 1, \dots, N$, los puntos donde se ubican las N fuentes puntuales (fuentes industriales) que emiten K especies contaminantes. Se asume que la velocidad con la que decae cada una de estas sustancias es proporcional a su concentración en la atmósfera. La tasa de emisión que corresponde a cada fuente puntual se denota como $q_i(t)$, $i = 1, \dots, N$. Finalmente, se denotan con $\phi_k(\mathbf{r}, t)$ a la concentración del k -ésimo contaminante dentro de la región \mathbf{D} en el punto \mathbf{r} al tiempo t .

Es importante destacar que se supone aquí que la región de estudio \mathbf{D} contiene a todas las fuentes puntuales de emisión de los contaminantes, y por lo tanto, no habrá contribuciones externas a la polución dentro del dominio \mathbf{D} . Tomando en cuenta esto en el balance de masa,

la propagación de los contaminantes en la atmósfera se puede describir a través del siguiente sistema de ecuaciones (Parra-Guevara et al., 2010).

$$\frac{\partial \phi_k}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi_k + \nabla \cdot \vec{\phi}_k^s - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi_k) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} \right) + \sigma_k \phi_k = f_k(\mathbf{r}, t) \quad \text{en } \mathbf{D} \times (0, T) \quad (3.1)$$

$$\phi_k(\mathbf{r}, 0) = \phi_k^0(\mathbf{r}) \quad \text{en } \mathbf{D} \quad (3.2)$$

$$\vec{\phi}_k^s = -v_k^s \phi_k \mathbf{e}_3 \quad \text{en } \mathbf{D} \quad (3.3)$$

$$\mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} - U_n \phi_k = -v_k^s \phi_k \quad \text{en } S_H^- \quad (3.4)$$

$$\mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} = -v_k^s \phi_k \quad \text{en } S_H^+ \quad (3.5)$$

$$\mu \nabla \phi_k \cdot \vec{n} - U_n \phi_k = 0 \quad \text{en } S^- \quad (3.6)$$

$$\mu \nabla \phi_k \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{en } S^+ \quad (3.7)$$

$$\hat{\mu} \nabla \phi_k \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{en } S_0 \quad (3.8)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad \text{en } \mathbf{D} \quad (3.9)$$

Donde $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = (u, v, w)$ denota la velocidad del viento en la región \mathbf{D} y se supone que cumple la ecuación de continuidad (3.9). Además, $\sigma_k = \sigma_k(\mathbf{r}, t) \geq 0$ es el coeficiente de transformación química de la k -ésima especie contaminante, y los coeficientes $\mu = \mu(\mathbf{r}, t) > 0$ y $\hat{\mu} = \hat{\mu}(\mathbf{r}, t) > 0$ denotan a los tensores de difusión turbulenta, es decir,

$$\mu = \begin{pmatrix} \mu_x(\mathbf{r}, t) & 0 \\ 0 & \mu_y(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \hat{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_x(\mathbf{r}, t) & 0 & 0 \\ 0 & \mu_y(\mathbf{r}, t) & 0 \\ 0 & 0 & \mu_z(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

respectivamente, y $f_k(\mathbf{r}, t)$ es el forzamiento formado por las tasas de emisión para el k -ésimo contaminante:

$$f_k(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N q_{ik}(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (3.11)$$

donde $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ es la función delta de Dirac centrada en la posición de la i -ésima fuente puntual. Hay que notar que la tasa de emisión de cada fuente es la suma de las tasas para cada contaminante, es decir,

$$q_i(t) = \sum_{k=1}^K q_{ik}(t) \quad (3.12)$$

La ecuación (3.2) define a ϕ_k^0 como la distribución espacial de la k -ésima especie contaminante al tiempo $t = 0$ sobre \mathbf{D} , es decir, ϕ_k^0 es el residuo del k -ésimo contaminante en la atmósfera que dejó la actividad industrial en un intervalo de tiempo pasado (por ejemplo durante el día anterior). En la ecuación (3.1), el término $\nabla \cdot \vec{\phi}_k^s$ describe el cambio en la concentración de la sustancia observada (p. ej. algún tipo de partículas), por unidad de tiempo, y debido a la sedimentación; tal proceso está caracterizado por la velocidad constante de sedimentación $v_k^s > 0$.

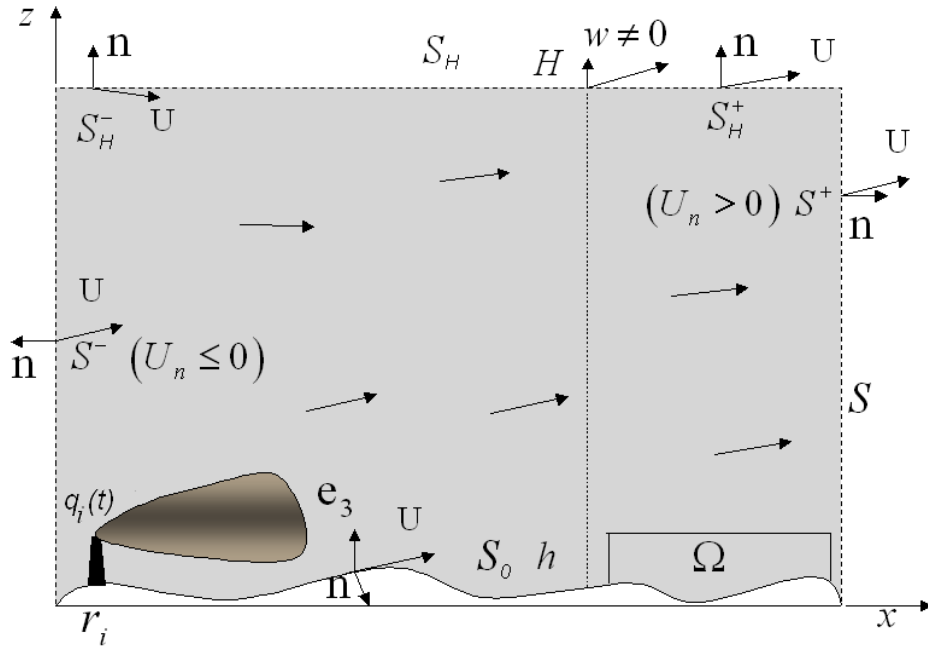


Fig. 3.1. Proyección en el plano x - z del modelo conceptual de dispersión.

La frontera $\partial\mathbf{D}$ se ha dividido en cinco partes, dos para el flujo horizontal, es decir, S^+ se define como los puntos de S tal que $U_n = \mathbf{U} \cdot \bar{\mathbf{n}} > 0$, donde $\bar{\mathbf{n}}$ es el vector normal exterior, y S^- se define como el complemento ($U_n = \mathbf{U} \cdot \bar{\mathbf{n}} \leq 0$). Dos para la frontera superior: S_H^- es la parte de la frontera donde la sedimentación es el resultado de la difusión menos la advección (ecuación 3.4), y S_H^+ que implica que la sedimentación es igual a la difusión (ecuación 3.5). Por último, en S_0 , que es la frontera inferior, se tiene que la difusión es cero debido a que el flujo es tangente a la superficie irregular (ecuación 3.8). La condición de frontera (3.6) establece que cuando el viento ingresa a la región \mathbf{D} el flujo total del contaminante, tomando en cuenta difusión y advección, es igual a cero, por lo cual, en S^- no hay salida o entrada de la especie contaminante. La condición de frontera (3.7) establece que cuando el viento sale de la región \mathbf{D} se desprecia el flujo difusivo turbulento en comparación con el flujo advectivo del contaminante, por lo tanto, la salida de la especie contaminante sólo es por advección. Estas condiciones de frontera fueron definidas por Marchuk (1982, 1986), y generalizadas al caso de tres dimensiones por Skiba (1993, 1997).

Para concluir la definición del modelo (3.1)-(3.9) se discute el significado de la ecuación de continuidad (3.9) que complementa dicho modelo de dispersión, la cual es una condición de incompresibilidad.

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

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

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

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

se obtiene que, un fluido es incompresible si y solo si $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$.

Los líquidos tienen un cambio relativo de densidad sumamente bajo respecto de la presión, por lo cual se consideran incompresibles, sin embargo, los gases si presentan compresibilidad. Ya que el aire es una mezcla de gases es necesario establecer un rango de comportamiento en el que éste se pueda considerar como un fluido incompresible.

Si se considera la ecuación de Bernoulli

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

se aproxima el incremento $\Delta\rho$ como $\left(\frac{\partial\rho}{\partial P}\right)\Delta P$ y se define $a^2 = \frac{\partial P}{\partial\rho}$ (velocidad local del sonido),

entonces se obtiene que

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

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

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

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

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

Es decir, hay un cambio relativo de la densidad menor al 1% (cambio que es despreciable), por lo cual, el aire se considera un fluido incompresible y es posible usar la ecuación de continuidad $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$. Un criterio generalmente aceptado para considerar a un gas como un fluido incompresible es que $M < 0.3$, esto significa que $U < 100$ m/s, aproximadamente.

3.2 Unicidad y estabilidad de la solución del modelo de dispersión en el sentido clásico

Las condiciones de frontera (3.4) a (3.8) no sólo tienen un adecuado sentido físico, sino también poseen buenas características matemáticas, ya que hacen del modelo de dispersión (3.1)-(3.9) un problema bien formulado en el sentido de Hadamard (1923), es decir, la solución del problema (3.1)-(3.9) es única y es estable respecto de pequeñas perturbaciones en las

condiciones iniciales, más aún, es posible mostrar que hay estabilidad respecto de pequeñas perturbaciones en el forzamiento (Skiba y Parra-Guevara, 2000).

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

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + A\phi = f \tag{3.13}$$

$$\phi(0) = \phi^0 \tag{3.14}$$

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

Multiplicando la ecuación (3.13) por ϕ y agrupando términos se tiene

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

donde los paréntesis denotan el producto interior definido en el espacio H .

Considerando que el operador A es positivo semidefinido, y usando la desigualdad de Schwarz (Kreyszig, 1989), es posible establecer la siguiente estimación

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

Si se observa que

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

entonces, de la última estimación, se obtiene la siguiente desigualdad:

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

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

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

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

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

Dado que A es un operador lineal, la última desigualdad afirma que pequeñas variaciones en el forzamiento f y la condición inicial ϕ^0 inducen pequeñas variaciones en la solución ϕ del problema de evolución, esto es estabilidad (continuidad respecto de f y ϕ^0). El mismo razonamiento garantiza unicidad, es decir, si se consideran dos soluciones del problema (3.13)-(3.14), entonces, al restar las ecuaciones de evolución respectivas se tiene un problema de evolución donde la condición inicial y el forzamiento son nulos. De aquí se sigue que, de acuerdo a la última desigualdad, la norma de la diferencia de dichas funciones es cero, es decir, tales funciones deben ser iguales.

Con este resultado general lo único que falta establecer para probar que el modelo (3.1) - (3.9) está bien formulado es que el operador diferencial lineal

$$A\phi = \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \nabla \cdot \vec{\phi}^s - \nabla \cdot \mu \nabla \phi - \frac{\partial}{\partial z} \mu_z \frac{\partial \phi}{\partial z} + \sigma \phi$$

es positivo semidefinido (aquí se omite el subíndice k para abreviar el argumento). Para tal efecto, se considera el producto interior en $L_2(\mathbf{D})$ del término $A\phi$ con la función ϕ ,

$$(A\phi, \phi) = \int_{\mathbf{D}} \phi \mathbf{U} \cdot \nabla \phi d\mathbf{r} + \int_{\mathbf{D}} \phi \nabla \cdot \vec{\phi}^s d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{D}} \phi \nabla \cdot \mu \nabla \phi d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{D}} \phi \frac{\partial}{\partial z} \mu_z \frac{\partial \phi}{\partial z} d\mathbf{r} + \int_{\mathbf{D}} \sigma \phi^2 d\mathbf{r} \quad (3.15)$$

Ya que $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$ se tiene que $\nabla \cdot (\phi^2 \mathbf{U}) = 2\phi \mathbf{U} \cdot \nabla \phi$. Si se integra esta ecuación, y se usa el teorema de la divergencia (Kreyszig, 2006), entonces se puede escribir

$$\int_{\mathbf{D}} \phi \mathbf{U} \cdot \nabla \phi d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \int_{\partial \mathbf{D}} \phi^2 \mathbf{U} \cdot \vec{n} dS = \frac{1}{2} \left[\int_{S^+ \cup S_H^+} U_n \phi^2 dS + \int_{S^- \cup S_H^-} U_n \phi^2 dS \right] \quad (3.16)$$

También se tiene que $\phi \nabla \cdot \vec{\phi}^s = -\frac{1}{2} \nabla \cdot (v^s \phi^2 \vec{e}_3)$, integrado y utilizando el teorema de la divergencia, de nuevo obtenemos

$$\int_{\mathbf{D}} \phi \nabla \cdot \vec{\phi}^s d\mathbf{r} = -\frac{1}{2} \int_{\partial \mathbf{D}} v^s \phi^2 \left| \vec{e}_3 \cdot \vec{n} \right| dS = \frac{1}{2} \int_{S_0} v^s \phi^2 \left| \vec{e}_3 \cdot \vec{n} \right| dS \quad (3.17)$$

Para la parte vertical de la difusión turbulenta se tiene la siguiente igualdad

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\phi \mu_z \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) = \left| \mu_z^{\frac{1}{2}} \frac{\partial \phi}{\partial z} \right|^2 + \phi \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial \phi}{\partial z} \right)$$

Integrando en la región \mathbf{D} tal ecuación, y considerando las condiciones de frontera (3.4) y (3.5), se obtiene el siguiente resultado.

$$\begin{aligned}
-\int_{\mathbf{D}} \phi \frac{\partial}{\partial z} (\mu_z \frac{\partial \phi}{\partial z}) d\mathbf{r} &= \int_{\mathbf{D}} \left| \mu_z^{\frac{1}{2}} \frac{\partial \phi}{\partial z} \right|^2 d\mathbf{r} - \int_{\partial \mathbf{D}} \phi \mu_z \frac{\partial \phi}{\partial z} dS \\
&= \int_{\mathbf{D}} \left| \mu_z^{\frac{1}{2}} \frac{\partial \phi}{\partial z} \right|^2 d\mathbf{r} + \int_{S_H} \nu^s \phi^2 dS - \int_{S_H} U_n \phi^2 dS
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Por otra parte, se tiene la relación $\nabla \cdot (\phi \mu \nabla \phi) = \phi \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) + \left| \mu^{\frac{1}{2}} \nabla \phi \right|^2$. Si se integra esta ecuación y se usa el teorema de divergencia, entonces se obtiene

$$-\int_{\mathbf{D}} \phi \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) d\mathbf{r} = \int_{\mathbf{D}} \left| \mu^{\frac{1}{2}} \nabla \phi \right|^2 d\mathbf{r} - \int_{\partial \mathbf{D}} \phi \mu \nabla \phi \cdot \vec{n} dS$$

Cuando la última integral se separa en las partes de la frontera S^+ y S^- , y se aplican las condiciones de borde respectivas (3.6) y (3.7), finalmente se tiene que

$$-\int_{\mathbf{D}} \phi \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) d\mathbf{r} = \int_{\mathbf{D}} \left| \mu^{\frac{1}{2}} \nabla \phi \right|^2 d\mathbf{r} - \int_{S^-} \phi^2 U_n dS \tag{3.19}$$

Si se sustituye en (3.15) las fórmulas integrales (3.16) a (3.19), y se reordenan los términos, se concluye que

$$\begin{aligned}
(A\phi, \phi) &= \int_{\mathbf{D}} \left\| \hat{\mu}^{\frac{1}{2}} \nabla \phi \right\|_2^2 d\mathbf{r} + \int_{\mathbf{D}} \sigma \phi^2 d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_{S_0} \nu^s \phi^2 \left| \vec{e}_3 \cdot \vec{n} \right| dS + \int_{S_H} \nu^s \phi^2 dS \\
&+ \frac{1}{2} \left\{ \int_{S^+ \cup S_H^+} U_n \phi^2 dS - \int_{S^- \cup S_H^-} U_n \phi^2 dS \right\} \geq 0, \quad \phi \in \Phi
\end{aligned} \tag{3.20}$$

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

Otra ventaja de que el operador diferencial lineal A del modelo (3.1) -(3.9) sea positivo semidefinido es que algunos de los esquemas de discretización numérica, basados en diferencias finitas, preservan esta propiedad, y por lo tanto, es fácil establecer la existencia, unicidad y estabilidad de la solución en el problema de dispersión discreto. Además, es posible usar métodos de separación de operadores por componentes para obtener la solución aproximada del modelo de dispersión, y por lo tanto, trasladar el problema de tres dimensiones a tres problemas simples en una dimensión. Tales esquemas para hallar la solución numérica de la concentración siempre representan una ventaja computacional ya que se ahorra memoria y tiempo de cómputo. En Skiba and Parra-Guevara (2015) se describe un esquema de este tipo que permite resolver el modelo de dispersión y su adjunto, tal esquema es balanceado y de segundo orden de aproximación.

3.3 Ecuación de balance de masa

Las condiciones de frontera (3.4) a (3.8) son fundamentales para establecer que el modelo de dispersión está bien formulado, de hecho, es posible aplicar estas condiciones para demostrar que el modelo satisface una ecuación de balance de masa que es consistente con el proceso de dispersión. Para obtener dicho resultado se integra la ecuación de transporte (3.1) sobre el dominio \mathbf{D} ,

$$\int_{\mathbf{D}} \left(\frac{\partial \phi_k}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi_k + \nabla \cdot \vec{\phi}_k^s - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi_k) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} \right) + \sigma_k \phi_k \right) d\mathbf{r} = \int_{\mathbf{D}} f_k(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \quad (3.21)$$

Si consideramos la ecuación de continuidad (3.9) se tiene la igualdad $\nabla \cdot (\phi_k \mathbf{U}) = \mathbf{U} \cdot \nabla \phi_k$. Si se aplica esta ecuación al segundo término de (3.21), junto con el teorema de la divergencia, se tiene que

$$\int_{\mathbf{D}} \mathbf{U} \cdot \nabla \phi_k d\mathbf{r} = \int_{\partial \mathbf{D}} \phi_k \mathbf{U} \cdot \vec{n} dS = \int_{S^+} \phi_k U_n dS + \int_{S^-} \phi_k U_n dS \quad (3.22)$$

Aplicando el teorema de la divergencia en el tercer término de (3.21) tenemos

$$\int_{\mathbf{D}} \nabla \cdot \vec{\phi}_k^s d\mathbf{r} = - \int_{\partial \mathbf{D}} v_k^s \phi_k \left| \vec{e}_3 \cdot \vec{n} \right| dS = \int_{S_0} v_k^s \phi_k \left| \vec{e}_3 \cdot \vec{n} \right| dS - \int_{S_H} v_k^s \phi_k dS \quad (3.23)$$

También, si se aplica el teorema de la divergencia en la cuarta integral de la ecuación (3.21), y se usan la condiciones de frontera (3.6) y (3.7), se tiene que

$$\int_{\mathbf{D}} \nabla \cdot (\mu \nabla \phi_k) d\mathbf{r} = \int_{S^-} \mu \frac{\partial \phi_k}{\partial n} dS = \int_{S^-} U_n \phi_k dS \quad (3.24)$$

Integrando el quinto término de (3.21) en la región \mathbf{D} se tiene

$$\int_{\mathbf{D}} \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} \right) d\mathbf{r} = \int_{\partial \mathbf{D}} \mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} dS = \int_{S_H^+} U_n \phi_k dS - \int_{S_H} v_k^s \phi_k dS \quad (3.25)$$

Al sustituir las ecuaciones (3.22) a (3.25) en la ecuación (3.21), y aplicando la propiedad de filtrado de la función delta de Dirac en el forzamiento f_k ,

$$\int_{\mathbf{D}} f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) d\mathbf{r} = f(\mathbf{r}_0)$$

se obtiene que

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbf{D}} \phi_k d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^N q_{ik}(t) - \int_{\mathbf{D}} \sigma_k \phi_k d\mathbf{r} - \int_{S_0} v_k^s \phi_k \left| \vec{e}_3 \cdot \vec{n} \right| dS - \int_{S^+ \cup S_H^+} \phi_k U_n dS \quad (3.26)$$

La ecuación (3.26) es la ecuación de balance de masa. Esta ecuación indica que la variación de la masa total de la k -ésima especie contaminante en el dominio \mathbf{D} , es igual a la suma de las tasas con que se emite, menos la tasa de transformación química, menos lo que sedimentación

en la base S_0 del dominio \mathbf{D} , menos la pérdida de masa contaminante que escapa por la frontera debido a la advección (notar que $U_n \geq 0$ en $S^+ \cup S_H^+$). Así, tal ecuación es consistente con el fenómeno de dispersión y transformación en la atmósfera.

De las ecuaciones (3.20) y (3.26) se concluye, que en ausencia de fuentes, las integrales $\int_{\mathbf{D}} \phi_k d\mathbf{r}$ y $\int_{\mathbf{D}} \phi_k^2 d\mathbf{r}$ decrecen con el tiempo. Además, si $\mu = 0$, $\mu_z = 0$, $\sigma_k = 0$, $v_k^s = 0$ y $U_n = 0$ sobre la frontera $\partial\mathbf{D}$, entonces ambas integrales se conservan en el tiempo, es decir,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbf{D}} \phi_k d\mathbf{r} = 0 \quad \text{y} \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbf{D}} \phi_k^2 d\mathbf{r} = 0 \quad (3.27)$$

Estas relaciones son útiles para probar el buen funcionamiento de los algoritmos de solución numérica, en particular de aquellos que se presentan en Skiba y Parra-Guevara (2015).

Capítulo 4

Modelo de dispersión adjunto

En este capítulo se formula la estimación adjunta para la concentración puntual y promedio de un contaminante atmosférico. Tales estimaciones permiten establecer una relación entre los parámetros de las fuentes de emisión y los datos de la concentración del contaminante recabados en una o varias estaciones de monitoreo ubicadas en los sitios $\mathbf{r}=\mathbf{r}_i$, o con los datos de la concentración promedio en una zona Ω de importancia ecológica. Estas estimaciones duales son ecuaciones integrales de Fredholm (Groetsch, 1993) que usan la solución de un modelo diferencial adjunto como núcleo, y tienen la ventaja de exhibir en forma explícita la influencia que la distribución inicial del contaminante y las tasas de emisión tienen sobre la concentración de dicha sustancia en los sitios $\mathbf{r}=\mathbf{r}_i$ o sobre la zona

Ω . Esta reformulación proporciona una técnica efectiva y económica en el estudio de la sensibilidad de los niveles de contaminación (Skiba y Parra-Guevara, 2000). En particular, provee una técnica eficiente para el análisis y solución del problema de control de emisiones industriales (Parra-Guevara y Skiba, 2003; 2006).

En general, las estimaciones directa y adjunta son elementos complementarios que permiten comprender los diferentes aspectos del proceso de dispersión de sustancias en la atmósfera y dar solución a los problemas de reubicación (Marchuck, 1986 y 1995) y control de emisiones industriales (Parra-Guevara et al., 2010; Liu, 2007; Parra-Guevara y Skiba, 2003; Skiba, 2003), así como la estimación de los parámetros de fuentes contaminantes desconocidas (Parra-Guevara y Skiba, 2013a, 2015).

Durante las últimas décadas se han desarrollado varias aplicaciones de las ecuaciones adjuntas en oceanología y meteorología dinámica. Marchuk (1986 y 1995), ha sugerido el uso de las soluciones de las ecuaciones adjuntas para estimar el promedio en espacio y tiempo de la anomalía de campos meteorológicos, y para estudiar la respuesta lineal de los modelos respecto las variaciones en las condiciones iniciales y el forzamiento. Una de las primeras aplicaciones de estas ideas fue el estudio del modelo lineal global tridimensional de la interacción térmica de la troposfera con los océanos y continentes (Marchuk y Skiba, 1976; Skiba, 1978).

Se puede afirmar que la idea de introducir ecuaciones adjuntas ha demostrado ser fructífera cuando se aplica en problemas del área de la física matemática y computación matemática tales como: física de la atmósfera y del océano, procesamiento y asimilación de datos, mecánica de los medios continuos, mecánica cuántica, ecología, modelos matemáticos en inmunología, control óptimo y remediación de sistemas acuáticos (Parra-Guevara y Skiba, 2007, 2013b); tanto en problemas lineales (Marchuck, 1986) como en modelos no-lineales (Vladimirov y Marchuck, 2000).

4.1 Definición del operador adjunto

La definición de operador adjunto para un operador definido en un espacio de Hilbert (usualmente un espacio de funciones con ciertas características de integrabilidad y/o

diferenciabilidad), tiene como objetivo generalizar la propiedad que posee la matriz transpuesta respecto del producto interior en el espacio euclidiano real, es decir,

$$(A\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}, A^t\mathbf{y})$$

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

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

Definición 4.1. Sea H un espacio de Hilbert con producto interior denotado por (\cdot, \cdot) y $L : H \rightarrow H$ un operador lineal con dominio $\Phi \subset H$ (Φ subespacio lineal de H). El operador adjunto de L es un operador lineal $L^* : H \rightarrow H$, con dominio $\Phi^* \subset H$ (Φ^* también subespacio lineal), que satisface la *identidad de LaGrange*:

$$(L\phi, g) = (\phi, L^*g) \quad \forall \phi \in \Phi \quad \text{y} \quad \forall g \in \Phi^* \tag{4.1}$$

Existencia del operador adjunto. Bajo las características que tiene el operador L en la definición 4.1 es posible afirmar que el operador adjunto L^* existe, es decir, siempre es posible construir un operador que satisfaga la identidad (4.1). Para este fin, se define al conjunto Φ^* como el subconjunto más grande en el espacio H tal que $g \in \Phi^*$, si y sólo si, la funcional lineal $\phi \mapsto (L\phi, g)$ es acotada.

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

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

Por otra parte, si $g \in \Phi^*$ entonces, por el Teorema de Riesz (Kreyszig, 1989), existe un único elemento $\xi \in H$ tal que

$$(L\phi, g) = (\phi, \xi)$$

Se define entonces el operador $L^* : \Phi^* \rightarrow H$ como: $L^*g = \xi$. Este operador está bien definido por la unicidad del elemento ξ , y de acuerdo con la última igualdad se satisface la identidad de LaGrange:

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

es decir, L^* es el operador adjunto.

Unicidad del operador adjunto. En general, el operador adjunto no es único según la definición dada anteriormente, ya que de acuerdo a la construcción anterior, si el operador L^* se restringe a cualquier subespacio propio de Φ^* , entonces también la restricción satisface la identidad (4.1).

Con el fin de establecer la unicidad, se supone que Φ es un espacio denso en H y se considera a L^* con dominio máximo, es decir, el mayor subespacio donde se cumple la identidad (4.1). Bajo estas condiciones, si F^* es un operador adjunto, entonces $\text{Dom}_{F^*} \subset \Phi^*$ (de lo contrario L^* se puede expandir al subespacio $\text{Dom}_{F^*} + \Phi^*$, y por lo tanto, Φ^* no sería dominio máximo). Así, para $g \in \text{Dom}_{F^*}$ se tiene que

$$(L\phi, g) = (\phi, F^*g) = (\phi, L^*g) \quad \forall \phi \in \Phi \quad \text{es decir,} \quad (\phi, F^*g - L^*g) = 0, \quad \forall \phi \in \Phi$$

Por otra parte, si $(\phi, h) = 0, \forall \phi \in \Phi$, entonces $h = 0$. Esta afirmación es cierta por la densidad de Φ en el espacio H . En efecto, primero hay que notar que existe una sucesión $\{\phi_n\}_{n=1}^{\infty}$ en H tal que $\phi_n \rightarrow h$; después, si $h \neq 0$ se tiene que

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

lo cual contradice la convergencia. De esta forma se concluye que $h = 0$.

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

Es importante destacar que, en general, el operador lineal L y su adjunto L^* son diferentes. Sólo en algunos casos particulares, como por ejemplo, el operador de Laplace con condiciones homogéneas de tipo Dirichlet o Neumann, 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 transfieren características de un operador a otro, por ejemplo, si L es definido positivo, entonces

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

por lo cual L^* también es definido positivo.

Por último, se consideran algunos ejemplos sencillos de operadores adjuntos donde se destaca la importancia de la identidad de LaGrange (4.1).

Ejemplo 4.1. Si $A \in M_{n \times n}(\mathbb{R})$ entonces el operador adjunto es la matriz transpuesta A^t . En este caso autoadjunto significa que la matriz A es simétrica ($A = A^t$).

Ejemplo 4.2. Si $L\phi = k\phi$ con dominio $\Phi = L_2(0,1)$, entonces $L^*g = kg$ con dominio $\Phi^* = \Phi$.

Lo anterior se sigue de observar que

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

Además, claramente L es un operador autoadjunto.

Ejemplo 4.3. Si $L\phi = u \frac{d\phi}{dx}$ con dominio $\Phi = \{\phi \in C^1[0,1] \mid \phi(0) = \phi(1)\} \subset L_2(0,1)$, entonces

$L^*g = -u \frac{dg}{dx}$ con dominio $\Phi^* = \Phi$. El resultado se sigue de la integración por partes

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

Así, se concluye también que L y L^* son operadores antisimétricos, es decir,

$$(L\phi, \phi) = (L^*g, g) = 0$$

Ejemplo 4.4. Si $L\phi = \mu \frac{d^2\phi}{dx^2}$ con dominio $\Phi = \{\phi \in C^2[0,1] \mid \phi'_+(0) = \phi'_-(1) = 0\} \subset L_2(0,1)$,

entonces $L^*g = \mu \frac{d^2g}{dx^2}$ con dominio $\Phi^* = \Phi$. El resultado se sigue de integrar dos veces por partes

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

Se concluye también que L es un operador autoadjunto.

4.2 Modelo de dispersión adjunto y estimaciones duales

En esta sección se establece el modelo adjunto asociado al modelo de dispersión (3.1)-(3.9). Sin pérdida de generalidad, se considera aquí sólo una sustancia contaminante en la

atmósfera, es decir, se supone que $K=1$ y se omite el subíndice k en las ecuaciones (3.1) a (3.9). En la sección final del capítulo se muestra que este modelo resulta ser la herramienta ideal para hacer el análisis de la sensibilidad lineal del valor promedio de la concentración de dicha sustancia en una región de importancia ecológica Ω contenida en \mathbf{D} .

El valor promedio de la concentración del contaminante en Ω , durante el intervalo de tiempo $[T-\tau, T]$, se estima de acuerdo al funcional.

$$I_{\Omega, \tau}(\phi) = \frac{1}{|\Omega|\tau} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \phi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt \quad (4.2)$$

donde $|\Omega|$ representa el volumen de la región de importancia ecológica. Además, para estimar la concentración puntual de dicha sustancia es posible introducir el siguiente funcional

$$I_{\mathbf{R}, T}(\phi) = \phi(\mathbf{R}, T) \quad (4.3)$$

donde \mathbf{R} es un punto en el dominio \mathbf{D} y $t = T$ es un instante de tiempo.

El funcional (4.3) puede considerarse el caso límite del funcional (4.2) cuando la región Ω se contrae al punto \mathbf{R} y τ tiende a cero, sin embargo, aquí se consideran como casos separados, es decir, para ambos funcionales se encuentra su formulación dual en términos de las soluciones del modelo adjunto (*funciones adjuntas o de influencia*).

Por otra parte, se debe notar que es posible hacer un análisis de sensibilidad de $I_{\Omega, \tau}$ aplicando únicamente el modelo de dispersión (3.1)-(3.9). Para esto, es necesario considerar una solución básica de (3.1)-(3.9), es decir, la solución que corresponde a un conjunto fijo de los parámetros del modelo, y posteriormente, calcular la solución con las correspondientes perturbaciones de estos parámetros. De esta forma, la anomalía $\delta I_{\Omega, \tau}$ es la diferencia de la concentración promedio para cada solución. De la misma forma es posible proceder para realizar un análisis de sensibilidad de la concentración puntual $I_{\mathbf{R}, T}$. Este enfoque

representa una alternativa al estudio de problemas ambientales como son el control de emisiones y la ubicación de nuevas fuentes industriales, ya que al perturbar las tasas de emisión o el sitio de descarga, por prueba y error, se podría determinar que tanto hay que reducir dichas tasas para que la concentración promedio cumpla la norma sanitaria respectiva, o que tanto hay que desplazar el sitio de emisión a fin de minimizar el impacto en una zona. Sin embargo, este procedimiento representa un gran esfuerzo computacional, ya que cada que se perturba un parámetro en el modelo (3.1)-(3.9), este se tiene que resolver para recalcular la nueva concentración ϕ y estimar las anomalías. Un enfoque de este tipo no es seguro ya que no siempre se encontrará una solución (óptima) al problema ambiental, además, se consume una gran cantidad de tiempo de cómputo, lo cual no sirve en los problemas ambientales que requieren respuestas inmediatas, como son los eventos de elevada contaminación del aire. El modelo adjunto, junto con el principio de dualidad que origina, representa una gran ventaja sobre este tipo de enfoque. Además, como ha sido explicado en el capítulo 2, las funciones adjuntas permiten formular problemas variacionales cuya solución es la tasa de emisión de una fuente puntual desconocida.

Formulación del operador adjunto A^* . Se considera A como el operador diferencial que contiene los procesos de transporte y transformación del contaminante que están representados en la ecuación de difusión-advección (3.1), es decir,

$$A\phi = \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \nabla \cdot \vec{\phi}^s - \nabla \cdot \hat{\mu} \nabla \phi + \sigma \phi \tag{4.4}$$

donde la matriz $\hat{\mu}$ está definida por la ecuación (3.10). Además, el dominio Φ del operador A está definido por las funciones ϕ en el espacio de Hilbert $L_2(\mathbf{D})$ tales que satisfacen las condiciones de frontera (3.4) a (3.8). El operador adjunto A^* se determina a través de la identidad de LaGrange (4.1). Para esto, se considera el producto de $A\phi$ con g respecto del producto interior del espacio $L_2(\mathbf{D})$,

$$(A\phi, g) = \int_{\mathbf{D}} g A \phi d\mathbf{r} = \int_{\mathbf{D}} g \mathbf{U} \cdot \nabla \phi d\mathbf{r} + \int_{\mathbf{D}} g \nabla \cdot \vec{\phi}^s d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{D}} g \nabla \cdot \hat{\mu} \nabla \phi d\mathbf{r} + \int_{\mathbf{D}} g \sigma \phi d\mathbf{r} \quad (4.5)$$

Utilizando la condición (3.9) y el teorema de la divergencia (Kreyszig, 2006) en las integrales de la ecuación (4.5) se obtienen las siguientes relaciones:

$$\int_{\mathbf{D}} g \mathbf{U} \cdot \nabla \phi d\mathbf{r} = \int_{\partial \mathbf{D}} g \phi \mathbf{U} \cdot \vec{n} dS - \int_{\mathbf{D}} \phi \mathbf{U} \cdot \nabla g d\mathbf{r} \quad (4.6)$$

$$\int_{\mathbf{D}} g \nabla \cdot \vec{\phi}^s d\mathbf{r} = \int_{\partial \mathbf{D}} g \vec{\phi}^s \cdot \vec{n} dS - \int_{\mathbf{D}} \phi \nabla \cdot \vec{g}^s d\mathbf{r} \quad (4.7)$$

$$\int_{\mathbf{D}} g \nabla \cdot \hat{\mu} \nabla \phi d\mathbf{r} = - \int_{\partial \mathbf{D}} \phi \hat{\mu} \nabla g \cdot \vec{n} dS + \int_{\partial \mathbf{D}} g \hat{\mu} \nabla \phi \cdot \vec{n} dS + \int_{\mathbf{D}} \phi \nabla \cdot \hat{\mu} \nabla g d\mathbf{r} \quad (4.8)$$

donde $\vec{g}^s = -v^s g \vec{e}_3$.

Sustituyendo las ecuaciones (4.6) a (4.8) en (4.5), separando la frontera $\partial \mathbf{D}$ en sus diferentes secciones (S_0 , S y S_H), y aplicando las condiciones de frontera (3.4) a (3.8) se obtiene

$$\begin{aligned} (A\phi, g) = & \int_{\mathbf{D}} \phi \left(-\mathbf{U} \cdot \nabla g - \nabla \cdot \vec{g}^s - \nabla \cdot \hat{\mu} \nabla g + \sigma g \right) d\mathbf{r} \\ & + \int_{S_0} \phi \left(\hat{\mu} \nabla g \cdot \vec{n} + \vec{g}^s \cdot \vec{n} \right) dS \\ & + \int_{S^+} \phi \left(\hat{\mu} \nabla g \cdot \vec{n} + U_n g \right) dS + \int_{S^-} \phi \left(\hat{\mu} \nabla g \cdot \vec{n} \right) dS \\ & + \int_{S_H^+} \phi \left(\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} + U_n g \right) dS + \int_{S_H^-} \phi \left(\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} \right) dS \end{aligned} \quad (4.9)$$

Finalmente, la identidad de LaGrange (4.1) se satisface si en la ecuación (4.9) todas las integrales sobre porciones de la frontera se anulan y al mismo tiempo se define $A^* g$ como el término dentro del paréntesis de la integral sobre el dominio \mathbf{D} . Es decir, el operador adjunto A^* se define como:

$$A^* = -\mathbf{U} \cdot \nabla g - \nabla \cdot \vec{g}^s - \nabla \cdot \hat{\mu} \nabla g + \sigma g \quad (4.10)$$

donde el correspondiente dominio Φ^* esta dado por las funciones g en el espacio de Hilbert $L_2(\mathbf{D})$ tales que satisfacen las siguientes condiciones de frontera:

$$\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} = 0 \text{ en } S_H^- \quad (4.11)$$

$$\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} + U_n g = 0 \text{ en } S_H^+ \quad (4.12)$$

$$\mu \nabla g \cdot \vec{n} = 0 \text{ en } S^- \quad (4.13)$$

$$\mu \nabla g \cdot \vec{n} + U_n g = 0 \text{ en } S^+ \quad (4.14)$$

$$\hat{\mu} \nabla g \cdot \vec{n} + \vec{g}^s \cdot \vec{n} = 0 \text{ en } S_0 \quad (4.15)$$

Hay que observar que en la ecuaciones (4.13) a (4.15) el vector \vec{n} denota el vector normal unitario, que apunta hacia afuera de la región \mathbf{D} , en la respectiva parte de la frontera. Además, en (4.13) y (4.14) la matriz μ se define por la ecuación (3.10).

Estimaciones duales. Con el fin de establecer el modelo adjunto de dispersión y las estimaciones duales para la concentración del contaminante se multiplica por g la ecuación (3.1) y se integra en el dominio $\mathbf{D} \times (0, T)$,

$$\int_0^T \int_{\mathbf{D}} g \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \nabla \cdot \vec{\phi}^s - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + \sigma \phi \right) d\mathbf{r} dt = \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g f(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt$$

Lo cual es equivalente a la siguiente ecuación:

$$\int_0^T \int_{\mathbf{D}} g \frac{\partial \phi}{\partial t} d\mathbf{r} dt + \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g A \phi d\mathbf{r} dt = \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g f(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt \quad (4.16)$$

Integrando por partes (respecto del tiempo) en la primera integral de (4.16) y definiendo la condición: $g(\mathbf{r}, T) = 0$ para $\mathbf{r} \in \mathbf{D}$, se obtiene

$$\int_0^T \int_{\mathbf{D}} g \frac{\partial \phi}{\partial t} d\mathbf{r} dt = - \int_{\mathbf{D}} g(\mathbf{r}, 0) \phi^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \phi \left(- \frac{\partial g}{\partial t} \right) d\mathbf{r} dt \quad (4.17)$$

Aplicando la identidad de LaGrange en la segunda integral de (4.16) se concluye que

$$\int_0^T \int_{\mathbf{D}} g A \phi d\mathbf{r} dt = \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \phi A^* g d\mathbf{r} dt \quad (4.18)$$

El uso de la propiedad de filtrado de la función delta de Dirac en la tercera integral de (4.16) conduce a la ecuación

$$\int_0^T \int_{\mathbf{D}} g f(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt = \sum_{i=1}^N \int_0^T q_i(t) g(\mathbf{r}_i, t) dt \quad (4.19)$$

Agrupando términos después de sustituir las ecuaciones (4.17) a (4.19) en (4.16) es posible escribir

$$\int_0^T \int_{\mathbf{D}} \phi \left(- \frac{\partial g}{\partial t} + A^* g \right) d\mathbf{r} dt = \int_{\mathbf{D}} g(\mathbf{r}, 0) \phi^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \sum_{i=1}^N \int_0^T q_i(t) g(\mathbf{r}_i, t) dt \quad (4.20)$$

La ecuación (4.20) sugiere que la correcta definición del modelo adjunto de dispersión es la siguiente:

$$- \frac{\partial g}{\partial t} + A^* g = - \frac{\partial g}{\partial t} - \mathbf{U} \cdot \nabla g - \nabla \cdot \vec{g}^s - \nabla \cdot (\mu \nabla g) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} \right) + \sigma g = p(\mathbf{r}, t) \quad (4.21)$$

$$g(\mathbf{r}, T) = 0 \text{ en } \mathbf{D} \quad (4.22)$$

$$\vec{g}^s = -v^s g \vec{e}_3 \text{ en } \mathbf{D} \quad (4.23)$$

$$\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} = 0 \text{ en } S_H^- \quad (4.24)$$

$$\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} + U_n g = 0 \text{ en } S_H^+ \quad (4.25)$$

$$\mu \nabla g \cdot \vec{n} = 0 \text{ en } S^- \quad (4.26)$$

$$\mu \nabla g \cdot \vec{n} + U_n g = 0 \text{ en } S^+ \quad (4.27)$$

$$\widehat{\mu} \nabla g \cdot \vec{n} + \overline{g^s} \cdot \vec{n} = 0 \text{ en } S_0 \quad (4.28)$$

donde el forzamiento $p(\mathbf{r}, t)$ en la ecuación (4.21) se define con el fin de relacionar directamente alguna característica de la función ϕ con la condición inicial ϕ^0 y los parámetros de las fuentes de emisión. Por ejemplo, si el forzamiento se define como

$$p(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau |\Omega|}, & \mathbf{r} \in \Omega \text{ y } t \in (T - \tau, T) \\ 0, & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (4.29)$$

Entonces, de la ecuación (4.20), se obtiene el *principio de dualidad* (estimación dual) para la concentración promedio del contaminante

$$I_{\Omega, \tau}(\phi) = \int_{\mathbf{D}} g(\mathbf{r}, 0) \phi^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \sum_{i=1}^N \int_0^T q_i(t) g(\mathbf{r}_i, t) dt \quad (4.30)$$

La ecuación (4.30) recibe este nombre porque indica que el funcional $I_{\Omega, \tau}$, definido inicialmente a través de (4.2), también se puede estimar por medio de la función adjunta g que es la solución del modelo (4.21)-(4.28) con forzamiento (4.29).

También, si el forzamiento $p(\mathbf{r}, t)$ se define como

$$p(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \delta(t - T) \quad (4.31)$$

entonces de la ecuación (4.20) se obtiene la estimación dual para la concentración puntual del contaminante

$$I_{\mathbf{R},T}(\phi) = \int_{\mathbf{D}} g(\mathbf{r},0)\phi^0(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \sum_{i=1}^N \int_0^T q_i(t)g(\mathbf{r}_i,t)dt \quad (4.32)$$

donde ahora la función adjunta g es la solución del modelo (4.21)-(4.28) con forzamiento (4.31). Como se explicó en el capítulo 2, esta última estimación resulta fundamental en la formulación del problema de regularización (2.22)-(2.24), y por lo tanto, en la solución del problema inverso de la recuperación de la tasa de emisión de una fuente puntual desconocida.

Por otra parte, es importante notar que el modelo adjunto (4.21)-(4.28) es un problema de valores finales. Este problema está bien formulado en el sentido de Hadamard (1923) si se resuelve de $t = T$ a $t = 0$. En efecto, ya que al reformular las ecuaciones con el cambio de variable: $t' = T - t$, y renombrando la velocidad $\mathbf{U}' = -\mathbf{U}$, se tiene que el modelo (4.21)-(4.28) tiene la misma estructura que el modelo de valor inicial (3.1)-(3.9), entonces, es posible probar la existencia, la unicidad y la estabilidad de la solución del modelo adjunto exactamente como en la sección 3.2 (Skiba y Parra-Guevara, 2000).

Además, se observa que las ecuaciones (4.30) y (4.32) muestran la influencia explícita que tienen sobre la concentración promedio o puntual de los contaminantes las tasas de emisión, los sitios de descarga y la distribución inicial de dichas sustancias en la región \mathbf{D} . Es importante notar que la solución g del problema adjunto (4.21)-(4.28) no depende de estos parámetros. Por lo tanto, g sólo actúa como una función de peso que pondera la distribución inicial del contaminante ϕ^0 y las tasas de emisión $q_i(t)$, $i = 1, \dots, N$. Este resultado es fundamental para resolver el problema de control de emisiones, formular estrategias de remediación de sistemas acuáticos mediante la descarga de nutrientes y la estimación de la tasa de emisión de fuentes desconocidas.

Finalmente, hay que considerar que aun cuando las funciones solución ϕ y g permiten estimar la misma concentración promedio $I_{\Omega,\tau}$ a través de (4.2) y (4.30), estimaciones directa y adjunta, respectivamente, se debe entender que, en general, estas son funciones complementarias, ya que g en (4.30) sólo permite conocer la concentración promedio en Ω , mientras que ϕ nos permite conocer además la concentración del contaminante en toda la región de estudio \mathbf{D} . De esta forma, dependiendo de las preguntas por contestar asociadas al problema ecológico se puede usar ϕ o g , o ambas. Obviamente, el mismo argumento es válido para las soluciones directa y adjunta que permiten estimar la concentración puntual del contaminante.

4.3 Análisis de sensibilidad de la concentración promedio $I_{\Omega,\tau}$

La ecuación (4.30) permite hacer un análisis de sensibilidad de la concentración $I_{\Omega,\tau}$ respecto de los parámetros ϕ^0 y q_i ($i = 1, \dots, N$), manteniendo \mathbf{U} , $\hat{\mu}$, σ , ν^s , Ω , τ y \mathbf{r}_i ($i = 1, \dots, N$) fijos, sin necesidad de resolver en forma repetida el modelo de dispersión (3.1)-(3.9). Es decir, para estimar el cambio o variación $\delta I_{\Omega,\tau}$, cuando hay perturbaciones $\delta\phi^0$ y δq_i ($i = 1, \dots, N$) respecto de un estado básico en los parámetros que definen al problema de emisiones, se debe resolver sólo una vez el problema (4.21)-(4.28) en dicho estado básico, almacenar la solución adjunta g , y posteriormente calcular la variación de la concentración promedio evaluando las integrales en (4.30) para las perturbaciones respectivas. Para cualquier otra perturbación de estos parámetros se puede evaluar nuevamente la ecuación (4.30) con la misma función adjunta g . Es decir,

$$\delta I_{\Omega,\tau}(\phi) = \int_{\mathbf{D}} g(\mathbf{r}, 0) \delta\phi^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \sum_{i=1}^N \int_0^T \delta q_i(t) g(\mathbf{r}_i, t) dt$$

Este procedimiento representa menor esfuerzo, ya que es computacionalmente más económico evaluar integrales que resolver un problema diferencial como el modelo de dispersión (3.1)-(3.9).

En una forma más general, es posible hacer un análisis de sensibilidad de $\delta I_{\Omega, \tau}$ respecto de todos los parámetros que aparecen en el modelo de dispersión (3.1)-(3.9). Para esto, se considera que los parámetros \mathbf{U} , $\hat{\mu}$, σ , ν^s , Ω , τ , ϕ^0 , q_i y \mathbf{r}_i ($i = 1, \dots, N$) están fijos, es decir, estos parámetros definen un estado básico del modelo directo y adjunto. Se denota con $\delta \mathbf{U}$, $\delta \hat{\mu}$, $\delta \sigma$, $\delta \nu^s$, $\delta \phi^0$, δq_i y $\delta \mathbf{r}_i$ ($i = 1, \dots, N$) a las pequeñas perturbaciones correspondientes al estado básico. Con estas perturbaciones la concentración ϕ presenta una perturbación $\delta \phi$, y por lo tanto, el funcional $I_{\Omega, \tau}$ cambia con una variación $\delta I_{\Omega, \tau}$. El objetivo ahora es estimar el valor de $\delta I_{\Omega, \tau}$ hasta primer orden de aproximación. Para lograr esto se considera a $\phi + \delta \phi$ como la solución del siguiente problema de dispersión:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\phi + \delta\phi)}{\partial t} + (\mathbf{U} + \delta\mathbf{U}) \cdot \nabla(\phi + \delta\phi) + \nabla \cdot (\overline{\phi^s} + \delta\overline{\phi^s}) - \nabla \cdot ((\mu + \delta\mu)\nabla(\phi + \delta\phi)) \\ - \frac{\partial}{\partial z} \left((\mu_z + \delta\mu_z) \frac{\partial(\phi + \delta\phi)}{\partial z} \right) + (\sigma + \delta\sigma)(\phi + \delta\phi) = \delta f(\mathbf{r}, t) \quad \text{en } \mathbf{D} \times (0, T) \end{aligned}$$

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

$$\overrightarrow{(\phi^s + \delta\phi^s)} = -\nu^s(\phi + \delta\phi)\mathbf{e}_3 \quad \text{en } \mathbf{D}$$

$$\mu_z \frac{\partial(\phi + \delta\phi)}{\partial z} - U_n(\phi + \delta\phi) = -\nu^s(\phi + \delta\phi) \quad \text{en } S_H^-$$

$$\mu_z \frac{\partial(\phi + \delta\phi)}{\partial z} = -\nu^s(\phi + \delta\phi) \quad \text{en } S_H^+$$

$$\mu \nabla(\phi + \delta\phi) \cdot \overrightarrow{n} - U_n(\phi + \delta\phi) = 0 \quad \text{en } S^-$$

$$\mu \nabla(\phi + \delta\phi) \cdot \overrightarrow{n} = 0 \quad \text{en } S^+$$

$$\hat{\mu} \nabla(\phi + \delta\phi) \cdot \vec{n} = 0 \quad \text{en } S_0$$

donde $\delta f(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N (q_i + \delta q_i) \delta(\mathbf{r} - (\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i))$. Note que, por sencillez, las perturbaciones se han considerado nulas en la frontera $\partial \mathbf{D}$.

Si multiplicamos la primera ecuación del sistema anterior por la solución g del modelo adjunto (4.21)-(4.28) en el estado básico, integramos en el dominio $\mathbf{D} \times (0, T)$ y usamos las condiciones iniciales y de frontera, entonces, al eliminar los términos de segundo orden, se obtiene la estimación de primer orden para la anomalía $\delta I_{\Omega, \tau}$ de la concentración promedio del contaminante en la región de importancia ecológica Ω .

$$\begin{aligned} \delta I_{\Omega, \tau} = & \int_{\mathbf{D}} g(\mathbf{r}, 0) \delta \phi^0 d\mathbf{r} + \sum_{i=1}^N \int_0^T q_i(t) (\nabla g(\mathbf{r}_i, t) \cdot \delta \mathbf{r}_i) dt + \sum_{i=1}^N \int_0^T \delta q_i(t) g(\mathbf{r}_i, t) dt \\ & - \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g(\mathbf{r}, t) \left(\delta \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \nabla \cdot \delta \vec{\phi}^s - \nabla \cdot (\delta \mu \cdot \nabla \phi) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\delta \mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} \right) + \delta \sigma \phi \right) d\mathbf{r} dt \end{aligned}$$

Esta última ecuación nos permite hacer el análisis de sensibilidad resolviendo sólo dos problemas diferenciales en el estado básico, el directo (3.1)-(3.9) y el adjunto (4.21)-(4.28), lo cual sigue presentando una ventaja computacional, ya que sólo hay que evaluar las integrales de la última ecuación en las perturbaciones correspondientes para estimar $\delta I_{\Omega, \tau}$.

En particular, esta aproximación al estudio de la sensibilidad del funcional $I_{\Omega, \tau}$ resulta de gran utilidad para determinar la reubicación de una fuente contaminante en la región \mathbf{D} bajo el criterio de reducir el impacto en una zona específica Ω o para determinar el sitio de una nueva fuente. En tales casos, hay que hacer un análisis de sensibilidad respecto de la ubicación \mathbf{r}_0 considerando fijos el resto de los parámetros, incluyendo aquellos relacionados con el resto de las fuentes contaminantes en la región. En esta situación, la variación de la concentración promedio se estima como

$$\delta I_{\Omega, \tau}(\phi) = \int_0^T q_0(t) \{g(\mathbf{r}_0 + \delta \mathbf{r}_0, t) - g(\mathbf{r}_0, t)\} dt$$

donde g es la solución del modelo adjunto (4.21)-(4.28), $q_0(t)$ es la tasa de emisión de la fuente y \mathbf{r}_0 es la ubicación de la fuente contaminante o una primera opción de asentamiento para la nueva fuente. La idea ahora es seleccionar $\delta \mathbf{r}_0$ tal que $\delta I_{\Omega, \tau} < 0$. El cambio $\delta \mathbf{r}_0$ ideal es aquel donde se cumple dicha condición y $|\delta I_{\Omega, \tau}|$ es máximo. Hay que notar que la función g no cambia en este análisis, es decir, el modelo adjunto solo se resuelve una vez, y cada ocasión que se modifica $\delta \mathbf{r}_0$ sólo hay que calcular una integral para obtener $\delta I_{\Omega, \tau}$. Además, la variación $\delta \mathbf{r}_0$ no tiene que ser de norma pequeña, ya que la última ecuación para $\delta I_{\Omega, \tau}(\phi)$ es exacta.

Capítulo 5

Modelo unidimensional y ejemplos de la solución del problema inverso

En este capítulo se presentan algunos ejemplos numéricos de la recuperación de la tasa de emisión de una fuente puntual no-estacionaria a través de diferentes conjuntos de datos. Se consideran dos tipos de modelos sencillos: un modelo de dispersión de dimensión cero y un modelo unidimensional. La ventaja de estudiar un método de regularización usando este tipo de modelos sencillos es que hay soluciones analíticas con las cuales es posible generar datos sintéticos de concentración, así como comparar el desempeño de la regularización.

5.1 Resultados numéricos para un modelo de dimensión cero

En esta sección se analiza el desempeño que el problema variacional (2.22)-(2.24) tiene a partir del modelo de dispersión de dimensión cero o modelo de caja que fue introducido en el capítulo 2 (sección 2.1). Se asume que la anomalía de la concentración del contaminante ϕ se describe por las siguientes ecuaciones (Parra-Guevara y Skiba, 2003).

$$\frac{d\phi}{dt} + \left(\sigma + \frac{1}{V}ua^2\right)\phi = \frac{1}{V}Q(t), \quad 0 < t < T \quad (5.1)$$

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

En este modelo se asume que el contaminante forma una mezcla homogénea con el aire en la región $\mathbf{D} = [0, a] \times [0, a] \times [0, a]$, la cual es un cubo con arista de longitud a y volumen $V = a^3$. La velocidad del viento \mathbf{u} se asume de tipo estacionario, con dirección perpendicular a una pared vertical de la caja. Finalmente, σ denota el coeficiente de transformación química del contaminante. Con estas simplificaciones, la ecuación (5.1) es un caso particular de la ecuación general de balance de masa (3.26), para un sólo contaminante, sin sedimentación ($u_k^s = 0$), y considerando una fuente puntual en la región \mathbf{D} con tasa de emisión $Q(t)$.

Con el fin de observar la inestabilidad del problema inverso se calcula $Q(t)$ directamente de la ecuación (5.1) a través de una serie de tiempo. Para este fin, en (5.1) se aplican fórmulas de diferencias finitas centradas de segundo orden de aproximación para obtener la siguiente ecuación:

$$\frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta t} + r \frac{\phi_{j+1} + \phi_{j-1}}{2} = \frac{1}{V}Q_j \quad (5.3)$$

donde $r = \sigma + \frac{1}{V} u \alpha^2$, Q_j aproxima el valor $Q(t_j)$ en los instantes $t_j = j\Delta t$, $j = 0, 1, \dots, L$, Δt es la longitud de tiempo entre los instantes de muestreo, y $\{\phi_j\}_{j=0}^L$ es la serie de tiempo para la anomalía de la concentración del contaminante.

De la ecuación (5.3) se obtiene el siguiente esquema numérico para reconstruir la tasa de emisión $Q(t)$ a partir de los datos ϕ_j :

$$Q_j = \frac{V}{2} \left\{ \left(r + \frac{1}{\Delta t} \right) \phi_{j+1} + \left(r - \frac{1}{\Delta t} \right) \phi_{j-1} \right\}, \quad j = 1, \dots, L \quad (5.4)$$

Para este esquema, debido a la condición inicial (5.2), se considera que $\phi_0 = 0$.

La serie de tiempo sintética que se utiliza para probar el esquema (5.4) se construye con base en el siguiente par de funciones asociadas al modelo de dispersión (5.1)-(5.2).

$$Q(t) = \begin{cases} A e^{-\gamma t} \sin^2(\pi t), & 0 \leq t \leq 2 \\ 0, & 0 < t \leq T \end{cases} \quad (5.5)$$

$$\phi(t) = \begin{cases} \frac{A}{2V} \left\{ \frac{e^{-\gamma t} - e^{-rt}}{r - \gamma} - s e^{-\gamma t} [2\pi \text{sen}(2\pi t) + (r - \gamma) \cos(2\pi t)] + s(r - \gamma) e^{-rt} \right\}, & 0 \leq t \leq 2 \\ \frac{A}{2V} e^{-rt} \left\{ \frac{e^{2(r-\gamma)} - 1}{r - \gamma} - s(r - \gamma) e^{2(r-\gamma)} + s(r - \gamma) \right\}, & 2 < t \leq T \end{cases} \quad (5.6)$$

Donde el coeficiente S que aparece en la ecuación (5.6) está definido como:

$$s = \frac{1}{4\pi^2 + (r - \gamma)^2} \quad (5.7)$$

La figura 5.1 muestra ambas funciones en el caso de los siguientes parámetros adimensionales: $\alpha = 1$, $u = 0.5$, $\sigma = 0.0001$, $T = 10$, $A = 100$ y $\gamma = 1$.

Considerando la función $\phi(t)$ definida por la ecuación (5.6), la serie de tiempo sintética está dada como:

$$\phi_j = \phi(t_j) + \delta\phi_j, \quad t_j = j\Delta t, \quad j=1, \dots, L \quad (5.8)$$

donde los errores $\{\delta\phi_j\}_{j=1}^L$ son valores aleatorios que satisfacen cierta distribución de probabilidad.

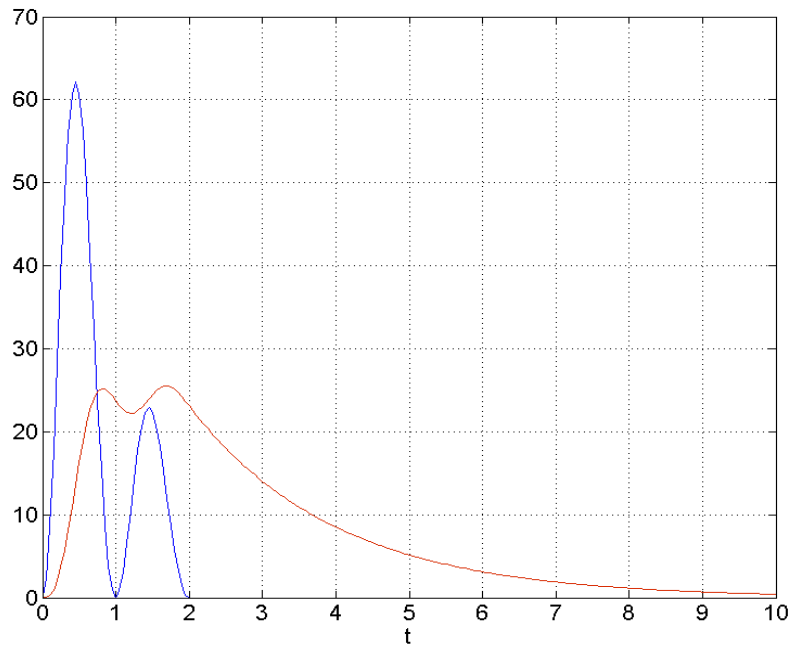


Fig. 5.1. Funciones de prueba: $Q(t)$ (línea azul) y $\phi(t)$ (línea roja).

La figura 5.2 muestra la serie de tiempo sintética construida con la ecuación (5.8) para un tamaño de paso $\Delta t = 0.05$, donde los valores aleatorios $\delta\phi_j$ están uniformemente distribuidos en el intervalo $(-0.5, 0.5)$. En este ejemplo, la amplitud de los errores está normalizada con un factor que es el 10% del valor máximo de la función ϕ .

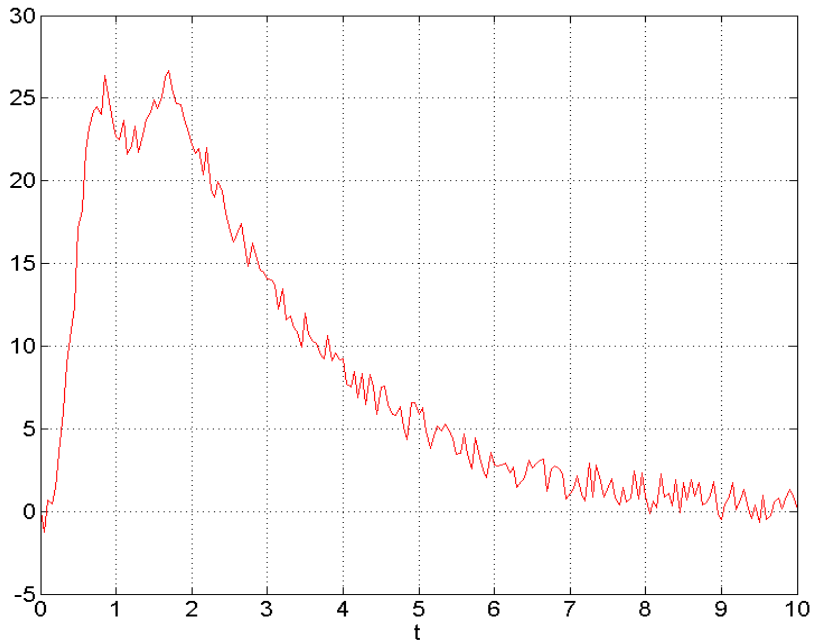


Fig. 5.2. Serie de tiempo $\{\phi_j\}_{j=0}^L$ de la anomalía de la concentración del contaminante.

Se muestra en la figura 5.3 la tasa de emisión aproximada $Q_a(t)$ que se obtiene a partir del esquema numérico (5.4) y la serie de tiempo representada en la figura 5.2. Se nota que la amplitud de los errores ha aumentado considerablemente, hasta ser de más de 20 unidades en algunos instantes, y por lo tanto, la función $Q(t)$ no ha sido estimada correctamente (gráfica en azul de la Fig. 5.3). Tal fenómeno de inestabilidad se explica de la siguiente forma. Substituyendo la ecuación (5.8) en el esquema numérico (5.4), se obtiene la siguiente estimación:

$$|Q_a(t_j) - Q(t_j)| \leq rV\delta\phi + V \left| \frac{\delta\phi_{j+1} - \delta\phi_{j-1}}{2\Delta t} \right| + o((\Delta t)^2) \quad (5.9)$$

donde $\delta\phi = \max_j \{|\delta\phi_j|\}$. Así, de acuerdo a la ecuación (5.9), el error en la estimación de la tasa $Q(t)$ se incrementa tanto por el error en los datos de concentración como por la derivada de dicho error: $\delta'Q(t_j) \approx (\delta\phi_{j+1} - \delta\phi_{j-1})/2\Delta t$.

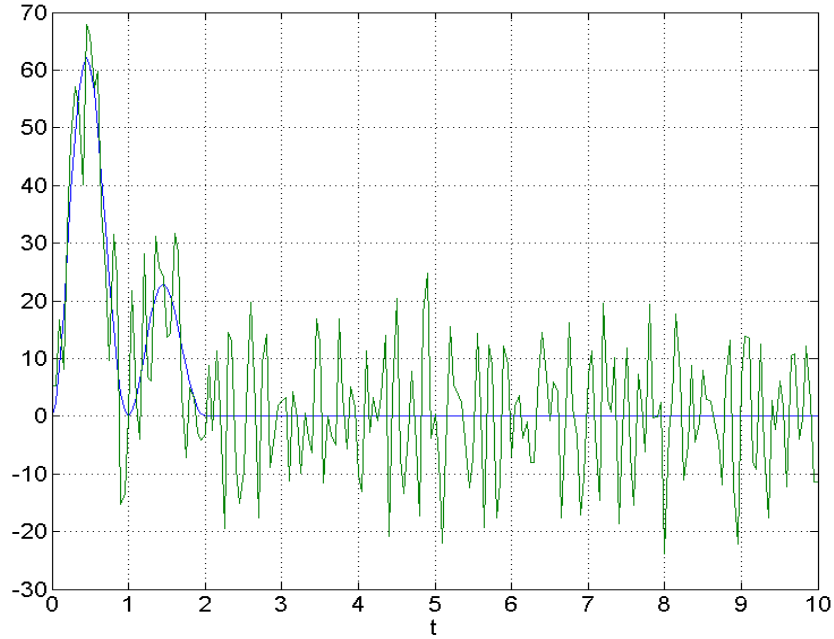


Fig. 5.3. Línea verde: tasa de emisión $Q_a(t)$ obtenida con el esquema (5.4).

En particular, si el número de datos considerados en el intervalo $(0, T)$ se incrementa, entonces la perturbación aleatoria $\delta\phi(t)$ es una función que tiene valores mayores en la derivada $\delta'\phi(t)$, y por lo tanto, la estimación de $Q(t)$ usando el esquema numérico (5.4) empeora. Este resultado numérico es consistente con la prueba de inestabilidad dada en el capítulo 2. Los resultados de otros esquemas para estimar $Q(t)$, basados también en diferencias finitas y aplicados sin una regularización, son similares (Groetsch, 1993).

Por otra parte, la estimación de la tasa de emisión $Q(t)$ a través del problema variacional (2.22)-(2.24) requiere una ecuación integral que compacte el proceso de dispersión y relacione explícitamente la variable de control y la de estado. En el caso del modelo (5.1)-

(5.2) tal ecuación se formula por medio de la transformada de Laplace (Brown, 1993), de la siguiente forma:

$$\phi(t) = \frac{1}{V} e^{-rt} \int_0^t Q(\xi) e^{r\xi} d\xi, \quad 0 < t < T \quad (5.10)$$

donde $r = \sigma + \frac{1}{V} u\alpha^2$. Así, la ecuación integral (2.14) se escribe en este caso como:

$$\phi(t_j) = \int_0^{t_j} Q(t) g_j(t) dt, \quad t_j = j\Delta t, \quad j = 1, \dots, L \quad (5.11)$$

donde el núcleo de la ecuación integral es $g_j(t) = \frac{1}{V} e^{-r(t_j-t)}$, $0 < t < t_j$. Note que $g_j(t)$ tiene la misma función que la solución adjunta en la formulación general del problema inverso. Además, debido a la condición de dispersión estacionaria, es posible introducir el siguiente núcleo básico: $g_\alpha(t) = \frac{1}{V} e^{-r(T-t)}$, $0 < t < T$. Se cumple entonces que $g_j(t) = g_\alpha(T - t_j + t)$ para $t \leq t_j$, que es la ecuación general (2.15).

Con el fin de resolver el problema variacional (2.22)-(2.24) se introduce ahora el siguiente conjunto de funciones básicas.

$$\gamma_l(t) = \begin{cases} 1 + (t - t_l) / \Delta t, & t_{l-1} \leq t \leq t_l \\ 1 - (t - t_l) / \Delta t, & t_l \leq t \leq t_{l+1} \\ 0, & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (5.12)$$

Aquí, los nodos $t_l = l \cdot \Delta t$, $l = 0, 1, \dots, L$, con $\Delta t \cdot L = T$, forman una malla regular en el intervalo $[0, T]$, y las funciones γ_0 y γ_L son iguales a cero fuera de tal intervalo. En esta base, la tasa de emisión $Q(t)$ se propone como:

$$Q(t) = \sum_{l=0}^L Q_l \gamma_l(t) \quad (5.13)$$

donde $Q_l = Q(t_l)$, $j=0,1,\dots,L$, debido a que $\gamma_l(t_j) = \delta_{lj}$ (delta de Kronecker).

Sustituyendo la ecuación (5.13) en las ecuaciones (2-22) y (2.23), y considerando la ecuación integral (5.11), se obtiene el siguiente problema de programación cuadrática:

$$\text{minimizar } J(\mathbf{Q}) = \frac{1}{2} \mathbf{Q}^t H \mathbf{Q} \quad (5.14)$$

$$\text{sujeto a: } -\varepsilon \leq \phi(t_j) - \sum_{l=0}^j a_{jl} Q_l \leq \varepsilon, \quad j=1,\dots,L \quad \text{y} \quad (5.15)$$

$$Q_l \geq 0, \quad l=0,1,\dots,L. \quad (5.16)$$

Donde $\mathbf{Q} = (Q_0, Q_1, \dots, Q_L)^t$, H es una matriz simétrica de dimensión $L+1$, tridiagonal y positiva semidefinida,

$$H = \frac{2}{\Delta t} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ddots & & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & -1 & 0 \\ \vdots & & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.17)$$

y los coeficientes a_{jl} en la ecuación (5.15) tienen la forma integral $a_{jl} = \int_{t_{l-1}}^{t_{l+1}} g_j(t) \gamma_l(t) dt$. Sin pérdida de generalidad, se ha supuesto que los instantes de muestreo coinciden con los nodos de la malla en el intervalo $[0, T]$.

El problema de optimización (5.14)-(5.16) tiene solución única ya que la función $J(\mathbf{Q})$ es continua y el espacio de factibilidad, determinado por las restricciones (5.15)-(5.16), es un

conjunto compacto (cerrado y acotado). Dicha solución se calcula aplicando directamente la rutina *quadprog* de MATLAB.

La figura 5.4 muestra la solución correspondiente a los datos sintéticos de la anomalía de la concentración $\{\phi_j\}_{j=0}^L$ generados según la ecuación (5.8), los cuales se muestran en la figura 5.2. Claramente, el método de regularización filtra la perturbación de alta frecuencia contenida en los datos de la concentración (perturbación aleatoria), y permite obtener una función suave que aproxima la tasa de emisión de prueba $Q(t)$. Note que la solución regularizada $Q_\epsilon(t)$ que se obtiene a través de (2.22)-(2.24) mejora considerablemente la aproximación obtenida con el esquema numérico (5.4), ver figura 5.3. El error relativo entre la solución regularizada $Q_\epsilon(t)$ y la tasa exacta $Q(t)$, dada por la ecuación (5.5), es de 9%, aproximadamente. Lo cual está dentro del rango del error relativo en los datos sintéticos de la anomalía de la concentración del contaminante, que es de 6%, aproximadamente. Este es el resultado más razonable que se espera obtener al procesar datos que presentan errores.

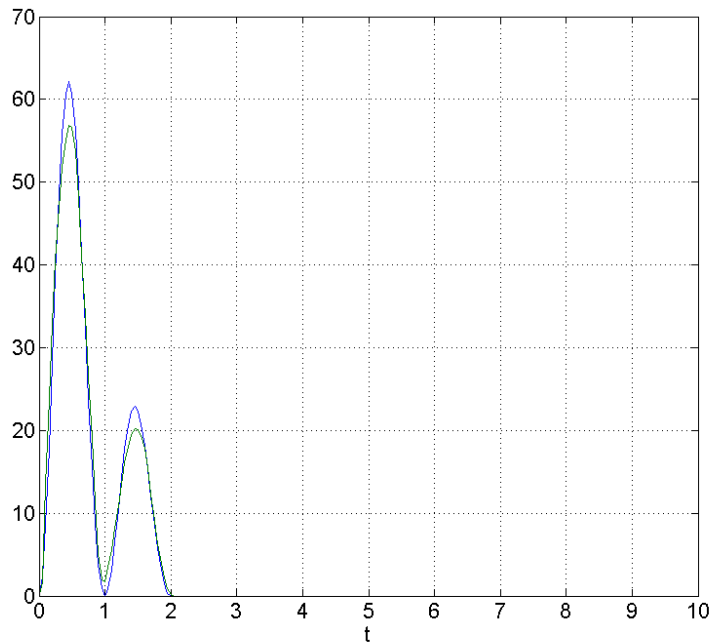


Fig. 5.4. Solución exacta $Q(t)$ (línea azul) y solución regularizada $Q_\epsilon(t)$ (línea verde) obtenida a través de (5.14)-(5.16).

Por otra parte, los resultados numéricos muestran que el parámetro de regularización ε que aparece en las restricciones (2.23) tiene una influencia en la suavidad de la solución del problema variacional (17)-(19). A mayor valor de ε , la función $Q_\varepsilon(t)$ es más suave y plana. De hecho, si $\varepsilon \rightarrow +\infty$ entonces la solución $Q_\varepsilon(t)$ tiende a una constante k (función clase C^∞), esto se debe a que el espacio de factibilidad se expande hasta que en el límite contiene este mínimo global de la función objetivo J (note que $J(k) = 0$). En el otro extremo, cuando $\varepsilon \rightarrow \delta\phi^+$,

$$\delta\phi = \max_j \{|\delta\phi_j|\} > 0 \tag{5.18}$$

entonces se obtiene la mejor aproximación de la tasa de emisión $Q(t)$ que la regularización aporta. La figura 5.5 muestra dicho comportamiento para la serie de tiempo que se presenta en la figura 5.2, donde el valor del parámetro ε se define por la relación $\varepsilon = e \cdot \delta\phi$. La tabla 5.1 muestra el comportamiento del error relativo correspondiente.

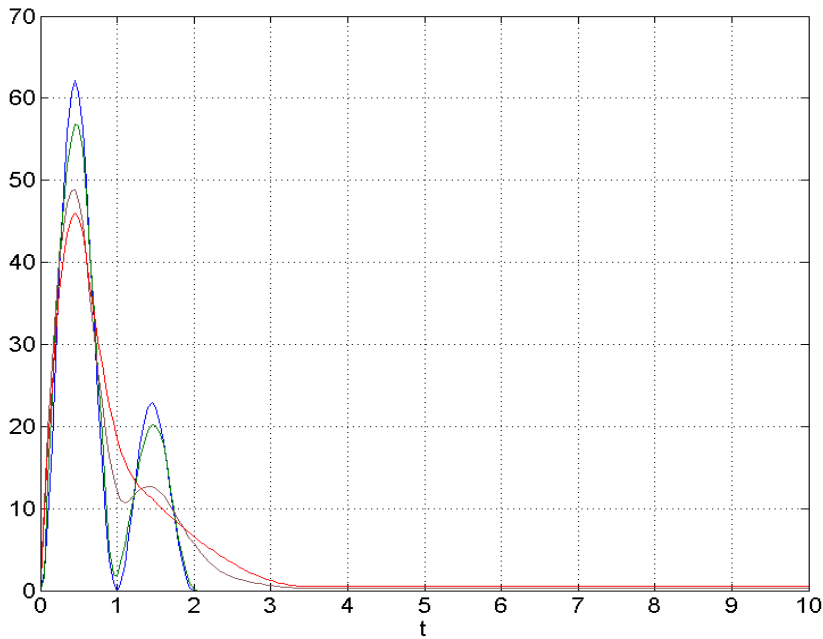


Fig. 5.5. Comportamiento de la solución regularizada $Q_\varepsilon(t)$ cuando $\varepsilon \rightarrow \delta\phi^+$:

$e=3$ (línea roja), $e=2$ (línea café) y $e=1$ (línea verde).

Tabla 5.1. Comportamiento del error relativo cuando $\varepsilon \rightarrow \delta\phi^+$.

e	$\ Q_\varepsilon - Q\ _2 / \ Q\ _2$
3.0	0.3754
2.0	0.2921
1.0	0.0918

Finalmente, cuando $\varepsilon < \delta\phi$ entonces la solución del problema (2.22)-(2.24) presenta oscilaciones (inestabilidad). De esta forma, el valor $\delta\phi$ determina el umbral entre la zona de inestabilidad y la región donde es seguro aproximar la tasa de emisión. Dicho umbral depende de la precisión del instrumento con el que se ha estimado la anomalía de la concentración ϕ . Note que en el caso donde el valor $\delta\phi$ es desconocido, tal cambio en el comportamiento de la solución del problema (2.22)-(2.24) nos indica el punto donde se ha alcanzado el valor óptimo del parámetro de regularización ε .

Ya que en el modelo de dispersión (5.1)-(5.2) no se consideran variables en espacio, entonces no es posible comparar los resultados de la recuperación de la tasa de emisión respecto de diferentes conjuntos de datos. Tal análisis se considera en las siguientes secciones.

5.2 Resultados numéricos para un modelo de dimensión uno: recuperación de $Q(t)$ con series de tiempo

En esta sección se considera el siguiente modelo de difusión-reacción de dimensión uno para la anomalía de la concentración del contaminante $\phi = \phi(x, t)$.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \sigma \phi = Q(t) \delta(x - x_0), \quad 0 < x < \ell, \quad 0 < t < T \quad (5.19)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial x}(0, t) = 0, \quad t > 0 \quad (5.20)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial x}(\ell, t) = -\zeta \phi(\ell, t), \quad t > 0 \quad (5.21)$$

$$\phi(x, 0) = 0, \quad 0 < x < \ell \quad (5.22)$$

En la ecuación (5.19), $\sigma > 0$ representa el coeficiente de transformación del contaminante, $\mu > 0$ es el coeficiente de difusión y x_0 denota el sitio de la fuente puntual en el dominio $\mathbf{D} = (0, \ell)$ con tasa de emisión desconocida $Q(t)$. La condición de frontera (5.20) significa que no hay flujo del contaminante a través de $x = 0$, es decir, en esta parte la frontera está cerrada. La condición (5.21) significa que en $x = \ell$ la frontera está abierta, y el flujo del contaminante es proporcional a la concentración ϕ , donde el coeficiente de proporcionalidad es $\zeta > 0$. En consecuencia, la masa del contaminante en el dominio \mathbf{D} se incrementa debido a la tasa de emisión Q , y decrece a causa del flujo de salida por el punto frontera $x = \ell$ y la transformación química. Es decir, el modelo (5.19)-(5.22) satisface la siguiente ecuación de balance de masa:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^\ell \phi(x, t) dx = Q(t) - \zeta \phi(\ell, t) - \sigma \int_0^\ell \phi(x, t) dx \quad (5.23)$$

En forma similar al modelo tridimensional de dispersión (3.1)-(3.9), el modelo (5.19)-(5.22) está bien formulado en el sentido de Hadamard, ya que su solución existe, es única y depende continuamente de la condición inicial y el forzamiento. Este resultado es consecuencia de que el operador A definido como

$$A\phi = -\mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \sigma \phi \quad (5.24)$$

es no negativo. Es decir,

$$(A\phi, \phi) = \int_0^\ell \mu \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 dx + \zeta \phi^2(\ell, t) + \int_0^\ell \sigma \phi^2 dx > 0 \quad (5.25)$$

Resolviendo el problema de Sturm-Liouville correspondiente al modelo de difusión-reacción (5.19)-(5.22) es posible expresar la solución no negativa de dicho modelo a través de una serie de Fourier (Broman, 1989) en la siguiente forma:

$$\phi(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\int_0^t d_k Q(\xi) e^{-(\lambda_k^2 \mu + \sigma)(t-\xi)} d\xi \right) \cos(\lambda_k x) \quad (5.26)$$

donde los coeficientes d_k están dados por la ecuación

$$d_k = 2 \cos(\lambda_k x_0) \left[\ell + \frac{\mu}{\zeta} \text{sen}^2(\lambda_k \ell) \right]^{-1}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (5.27)$$

y $\{\cos(\lambda_k x)\}_{k=1}^{\infty}$ es un sistema ortogonal de funciones (eigenfunciones) que corresponde a las frecuencias $\{\lambda_k\}_{k=1}^{\infty}$ (eigenvalores). Tales frecuencias son las raíces de la siguiente ecuación:

$$\zeta \cos(\lambda \ell) - \lambda \mu \text{sen}(\lambda \ell) = 0 \quad (5.28)$$

Las cuales pueden ser eficientemente calculadas con algún método numérico, por ejemplo, con el método de Newton (Skiba, 2005).

Hay que notar que en los experimentos numéricos de esta sección se usa la serie de Fejér (Carslaw, 1952) calculada a partir de la serie de Fourier (5.26). Tal corrección es necesaria para asegurar la convergencia puntual de la serie a la función $\phi(x,t)$.

Esto significa que en la serie de Fourier (5.26) se utilizan los siguientes coeficientes de Fejér:

$$\tilde{d}_k = \left(1 - \frac{(k-1)}{K} \right) d_k, \quad k = 1, 2, \dots, K, \quad (5.29)$$

en lugar de los valores d_k . Aquí, el valor K es el número de truncación de la serie.

Por otra parte, la aplicación de la identidad de LaGrange, $(A\phi, g) = (\phi, A^*g)$, al sistema de ecuaciones (5.19)-(5.22) conduce al siguiente modelo adjunto:

$$-\frac{\partial g}{\partial t} - \mu \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + \sigma \phi = p(x, t), \quad 0 < x < \ell, \quad 0 < t < T \quad (5.30)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial x}(0, t) = 0, \quad t > 0 \quad (5.31)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial x}(\ell, t) = -\zeta g(\ell, t), \quad t > 0 \quad (5.32)$$

$$g(x, T) = 0, \quad 0 < x < \ell \quad (5.33)$$

Donde el forzamiento en la ecuación (5.30) se define como

$$p(x, t) = \delta(x - \mathbf{R})\delta(t - t_j) \quad (5.34)$$

y el punto \mathbf{R} es el sitio de monitoreo en el dominio \mathbf{D} .

Como se mostró en el capítulo 2, el uso de la solución del problema adjunto (5.30)-(5.33) conduce a la siguiente fórmula:

$$\phi(\mathbf{R}, t_j) = \int_0^{t_j} Q(t) g_j(x_0, t) dt \quad (5.35)$$

la cual es un caso particular de la ecuación (2.14). En este ejemplo, la función adjunta g_j también se expresa a través de una serie de Fourier como sigue:

$$g_j(x_0, t) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k e^{-\left(\lambda_k^2 \mu + \sigma\right)(t_j - t)} \cos(\lambda_k x_0), \quad t \leq t_j \quad (5.36)$$

donde los coeficientes de Fourier c_k se calculan en la siguiente forma:

$$c_k = 2 \cos(\lambda_k \mathbf{R}) \left[\ell + \frac{\mu}{\zeta} \operatorname{sen}^2(\lambda_k \ell) \right]^{-1}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (5.37)$$

Como se explicó previamente, en los experimentos numéricos se consideran los siguientes coeficientes de Fejér para la serie (5.36):

$$\hat{c}_k = \left(1 - \frac{(k-1)}{K} \right) c_k, \quad k = 1, 2, \dots, K \quad (5.38)$$

en lugar de los coeficientes c_k . Nuevamente, K denota el número de truncación de la serie (5.36).

Además, debido a la condición de dispersión estacionaria que hay en este ejemplo, el núcleo básico también se expresa como una serie:

$$g_\alpha(x_0, t) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k e^{-(\lambda_k^2 \mu + \sigma)(T-t)} \cos(\lambda_k x_0), \quad 0 < t < T \quad (5.39)$$

Tal función satisface la siguiente propiedad: $g_\alpha(x_0, T - t_j + t) = g_j(x_0, t)$, $t \leq t_j$ (ver la ecuación (2.15)).

La figura 5.6 muestra la tasa de emisión de prueba $Q(t)$ definida por la ecuación (5.5) y la correspondiente anomalía de concentración $\phi(\mathbf{R}, t)$ calculada a través de la serie de Fourier-Fejér (5.26). En este caso, los valores de los parámetros adimensionales utilizados son: $\mu = 0.5$, $\sigma = 0.0001$, $\zeta = 1.0$, $x_0 = 0.2$, $\mathbf{R} = 0.8$, $\ell = 1.0$, $A = 100$, $\gamma = 1.0$, $T = 10$, $\Delta t = 0.05$ y $K = 1000$.

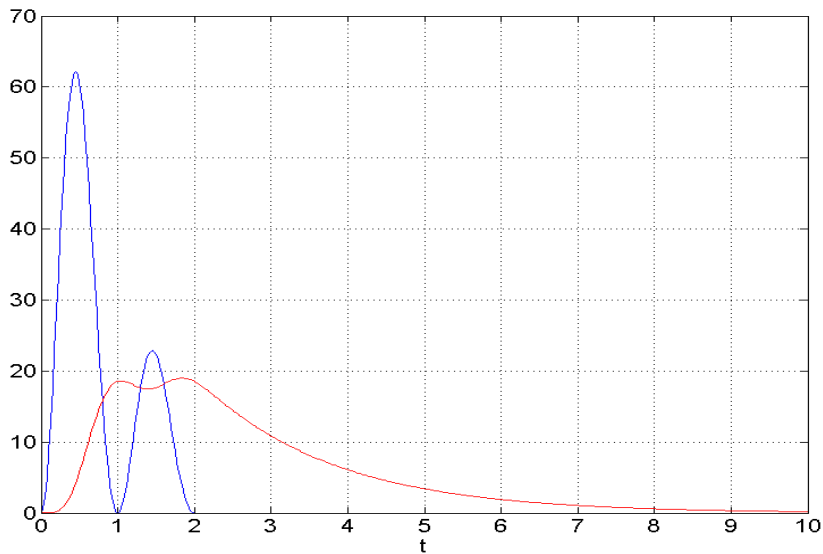


Fig. 5.6. Tasa de emisión de prueba $Q(t)$ (línea azul) y la anomalía $\phi(\mathbf{R},t)$ (línea roja) dada por (5.26).

En la figura 5.7 se muestra el núcleo básico $g_\alpha(x_0,t)$ calculado a través de la serie de Fourier-Fejér (5.39) y dos ejemplos de funciones adjuntas para los instantes $t_j = 3$ y $t_j = 6$. Como se observa en dicha figura, cada función adjunta es un desplazamiento o traslación en el tiempo de la función $g_\alpha(x_0,t)$ (ver la ecuación (2.15)).

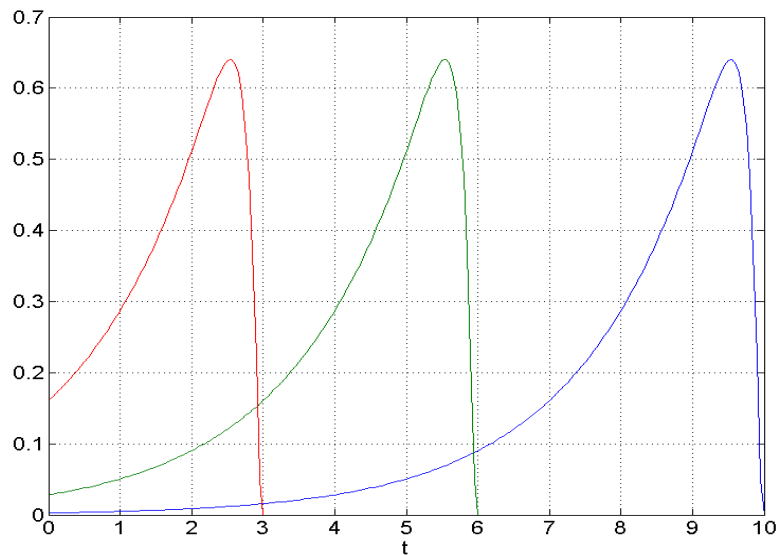


Fig. 5.7. Línea azul: núcleo básico $g_\alpha(x_0,t)$. Líneas roja y verde: funciones adjuntas $g_j(x_0,t)$ para los instantes $t_j = 3.0$ y $t_j = 6.0$, respectivamente.

Una vez calculadas todas las funciones adjuntas a través del núcleo básico (5.39) es posible considerar para este ejemplo un problema de programación cuadrática como el que está dado por las ecuaciones (5.14)-(5.16). La solución de dicho problema de optimización es la solución regularizada $Q_\epsilon(t)$.

Como en el primer ejemplo, la serie de tiempo sintética $\{\phi_j\}_{j=0}^L$ para la anomalía de la concentración del contaminante se obtiene por medio de la siguiente ecuación:

$$\phi_j = \phi(\mathbf{R}, t_j) + \delta\phi_j, \quad t_j = j\Delta t, \quad j = 0, 1, \dots, L \quad (5.40)$$

donde los valores $\phi(\mathbf{R}, t_j)$ se obtienen por medio de la serie (5.26) y los errores aleatorios $\{\delta\phi_j\}_{j=0}^L$ están uniformemente distribuidos.

La figura 5.8 muestra un ejemplo de la serie de tiempo (5.40) calculada para $\Delta t = 0.05$, donde los valores aleatorios $\delta\phi_j$ se distribuyen uniformemente en el intervalo $(-0.5, 0.5)$. En este ejemplo, la amplitud de los errores fue normalizada por un factor que es el 10% del valor máximo de la función $\phi(\mathbf{R}, t)$.

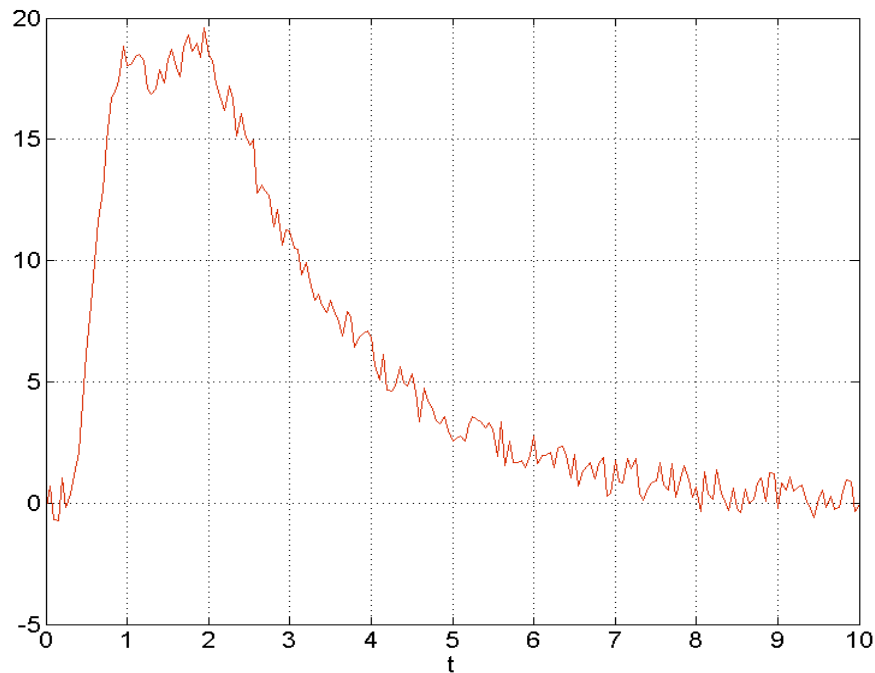


Fig. 5.8. Serie de tiempo sintética en $x = \mathbf{R}$ para la anomalía de la concentración del contaminante $\{\phi_j\}_{j=0}^L$.

En la figura 5.9 se muestra la tasa exacta $Q(t)$, dada por la ecuación (5.5), y la solución regularizada $Q_\varepsilon(t)$ que se obtiene para el valor óptimo del parámetro de regularización $\varepsilon = \delta\phi = \max_j \{|\delta\phi_j|\}$. En la figura 5.10 se muestra el comportamiento de las soluciones del problema de programación cuadrática cuando $\varepsilon \rightarrow \delta\phi^+$, donde $\varepsilon = e \cdot \delta\phi$, y $e = 3.0, 2.0$ y 1.0 . La tabla 5.2 muestra el comportamiento del error relativo correspondiente, donde el error relativo en los datos de concentración es de 6%, aproximadamente. Como en el primer ejemplo, dichas soluciones se obtuvieron usando la rutina *quadprog* de MATLAB (Venkataraman, 2002).

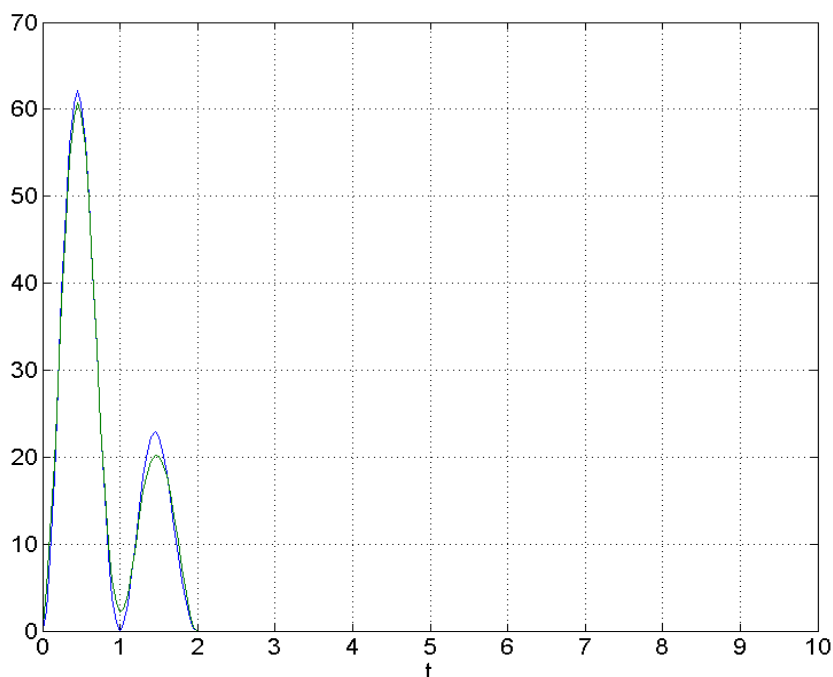


Fig. 5.9. Solución exacta $Q(t)$ (línea azul) y solución regularizada $Q_\varepsilon(t)$ (línea verde) obtenida para $\varepsilon = \delta\phi = \max_j \{|\delta\phi_j|\}$.

El comportamiento de la solución regularizada con respecto al parámetro ε es similar al descrito en el ejemplo de la sección 5.1. En efecto, para $\varepsilon = \delta\phi$ se obtiene la mejor aproximación de la tasa de emisión $Q(t)$ que este método de regularización proporciona.

El modelo (5.19)-(5.22) es interesante porque el contaminante emitido en el sitio $x_0 = 0.2$ al momento t , se propaga por difusión en ambas direcciones (a la izquierda y a la derecha). La porción del contaminante que se dispersa a la derecha es registrado en el sitio de monitoreo $\mathbf{R} = 0.8$ al momento $t_1 > t$; mientras que la otra porción del contaminante es registrada en un momento posterior $t_2 > t_1$ debido a un proceso de reflexión. Este fenómeno dinámico es consecuencia de que en $x = 0$ la frontera está cerrada. Tal proceso de retroalimentación es reconocido correctamente por las funciones adjuntas, las cuales contienen la información completa del proceso de dispersión. De esta forma, la recuperación de la tasa de emisión a través del problema de regularización (2.22)-(2.24) no distorsiona erróneamente la tasa $Q(t)$

introduciendo falsos impulsos en el tiempo (ver figura (5.9)). Esta es una de las ventajas que proporcionan las funciones adjuntas en el estudio de problemas dinámicos.

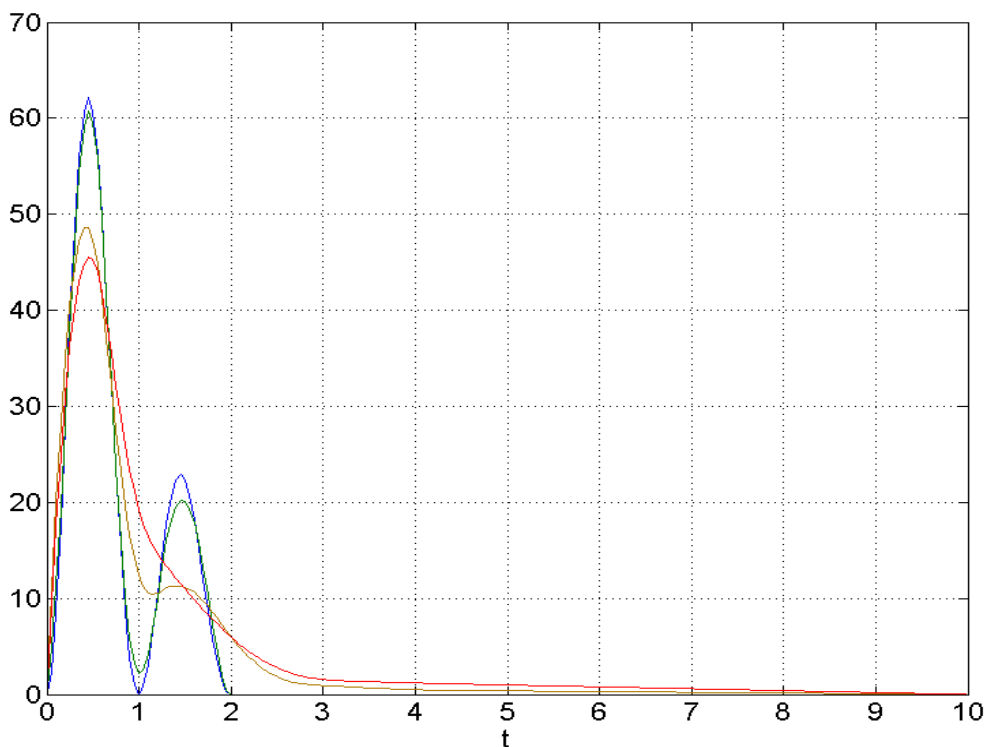


Fig. 5.10. Comportamiento de la solución regularizada $Q_\varepsilon(t)$ cuando $\varepsilon \rightarrow \delta\phi^+$:
 $e=3$ (línea roja), $e=2$ (línea café) y $e=1$ (línea verde).

Tabla 5.2. Comportamiento del error relativo cuando $\varepsilon \rightarrow \delta\phi^+$.

e	$\ Q_\varepsilon - Q\ _2 / \ Q\ _2$
3.0	0.3824
2.0	0.3057
1.0	0.0524

En la siguiente sección se estudia la recuperación de la tasa de emisión a través de datos de concentración espacialmente distribuidos.

5.3 Resultados numéricos para un modelo de dimensión uno: recuperación de $Q(t)$ con datos espacialmente distribuidos

En esta sección se analiza el desempeño que tiene el problema variacional (2.22)-(2.24) para estimar la tasa de emisión $Q(t)$ de una fuente puntual desconocida a partir de datos de concentración espacialmente distribuidos. Para tal efecto, se considera el modelo de dispersión de dimensión uno (5.19)-(5.22) y el correspondiente modelo adjunto (5.30)-(5.33). En este último modelo se usa el forzamiento (2.10) y la ecuación (2.11), es decir,

$$\phi(\mathbf{R}_i, T) = \int_0^T Q(t) g_i(x_0, t) dt \quad (5.41)$$

donde los puntos \mathbf{R}_i , $i=1,2,\dots,N$, se consideran sitios de monitoreo. Note que la ecuación (5.41) relaciona la tasa de emisión con la concentración de la anomalía en diferentes sitios \mathbf{R}_i para un mismo instante $t=T$. Tal conjunto de datos de concentración los designamos como *datos espacialmente distribuidos*.

La ecuación (5.41), junto con los datos sintéticos (espacialmente distribuidos),

$$\phi_i = \phi(\mathbf{R}_i, T) + \delta\phi_i, \quad \mathbf{R}_i = i\Delta x, \quad i=1,2,\dots,N \quad (5.42)$$

se utiliza en la restricción (2.23) del problema variacional. Además, para efectos de comparación con el ejemplo de la sección 5.2, en donde se utilizan series de tiempo, se considera ahora la misma función de prueba $Q(t)$ definida por (5.5) y los mismos valores de los parámetros adimensionales, es decir, $\mu = 0.5$, $\sigma = 0.0001$, $\zeta = 1.0$, $x_0 = 0.2$, $\ell = 1.0$, $A = 100$, $\gamma = 1.0$, $T = 10$, $\Delta t = 0.05$ y $K = 1000$. También, para efectos de comparación, se han elegido tantos datos ϕ_i como los considerados en la serie de tiempo del ejemplo en la sección

5.2, esto con el fin de tener el mismo número de restricciones en el problema variacional. Por lo tanto, se considera que $N = 200$, $\Delta x = \ell/N$ y $\mathbf{R}_i = i\Delta x$, $i = 1, 2, \dots, N$.

Como se explica más adelante, resulta importante observar que aún cuando se trata del mismo problema de la recuperación de la tasa $Q(t)$, con la misma cantidad de información que la utilizada en el ejemplo de la sección 5.2, el resultado es muy diferente. Lo cual se explica por la diferencia en la calidad de la información sobre la fuente que contiene una serie de tiempo de la concentración de la anomalía en oposición a los datos espacialmente distribuidos de la misma variable de estado.

En la figura 5.11 se muestra la anomalía de la concentración del contaminante $\phi(\mathbf{R}_i, T)$ que se obtiene a través de la serie de Fourier-Fejér (5.26), mientras que en la figura 5.12 se grafican los datos sintéticos obtenidos por medio de la ecuación (5.42). Los valores aleatorios $\delta\phi$ se distribuyen uniformemente en el intervalo $(-0.5, 0.5)$. Como en los ejemplos de las secciones 5.1 y 5.2, la amplitud de los errores fue normalizada por un factor que es el 10% del valor máximo de la serie $\phi(\mathbf{R}_i, T)$.

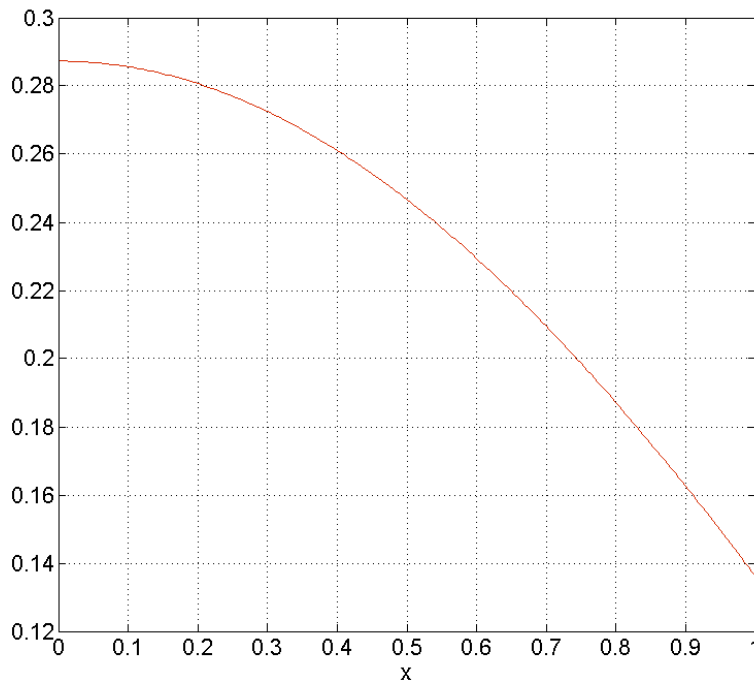


Fig. 5.11. Anomalía $\phi(\mathbf{R}_i, T)$ dada por la serie de Fourier-Fejér (5.26).

La figura 5.13 muestra las funciones adjuntas $g_i(x_0, t)$ que corresponden a los sitios de monitoreo $\mathbf{R}_i = 0.5, 0.8$ y 0.9 . Se nota que la amplitud en cada función adjunta se incrementa conforme \mathbf{R}_i se aproxima al punto de emisión $x_0 = 0.2$. Este efecto se debe al hecho de que la concentración de un contaminante es mayor cerca de la fuente de emisión (ver ecuación (5.41)).

Una vez calculadas todas las funciones adjuntas a través de la serie (5.39) es posible considerar para este ejemplo un problema de programación cuadrática como el que está dado por las ecuaciones (5.14)-(5.16). La solución de dicho problema de optimización es la solución regularizada $Q_\varepsilon(t)$.

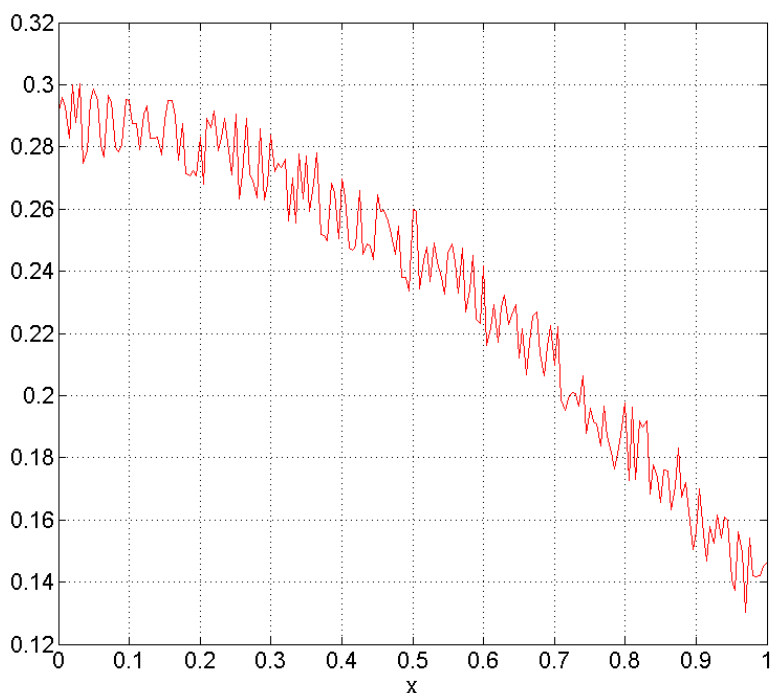


Fig. 5.12. Datos sintéticos para la anomalía de la concentración del contaminante $\phi_i, i = 1, \dots, N$.

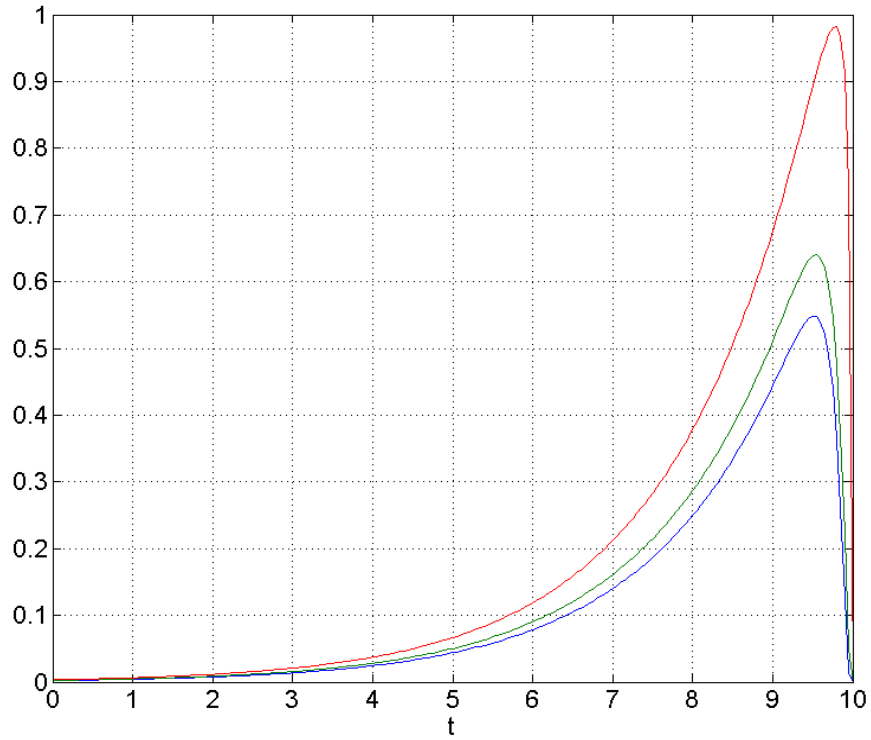


Fig. 5.13. Funciones adjuntas $g_i(x_0, t)$ para diferentes puntos \mathbf{R}_i : línea roja, $\mathbf{R}_i = 0.5$; línea verde, $\mathbf{R}_i = 0.8$; y línea azul, $\mathbf{R}_i = 0.9$.

La figura 5.14 muestra la solución regularizada $Q_\varepsilon(t)$ para $\varepsilon = \delta\phi = \max_i \{|\delta\phi_i|\}$. Al comparar con la figura 5.6 (línea azul), se observa que el resultado es erróneo.

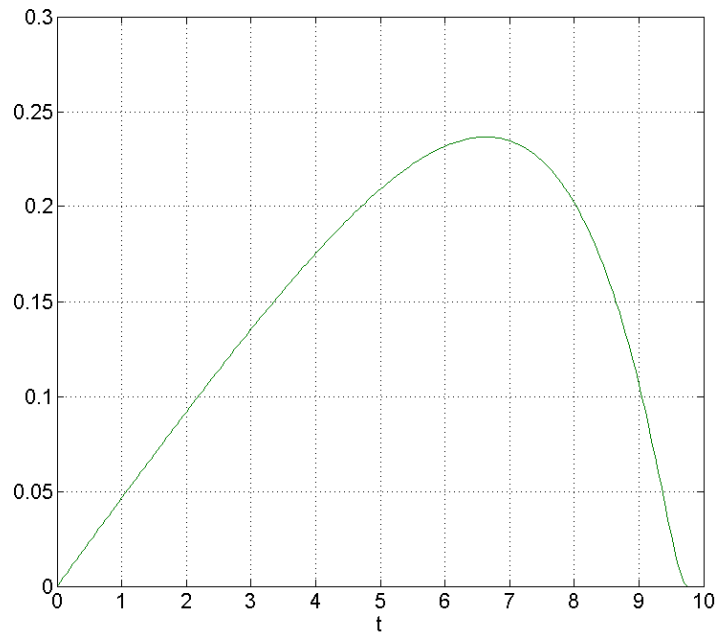


Fig. 5.14. Solución regularizada $Q_\varepsilon(t)$ obtenida para $\varepsilon = \delta\phi = \max_j \{|\delta\phi_j|\}$.

Sin embargo, las figuras 5.15 y 5.16 muestran que la tasa de emisión $Q_\varepsilon(t)$ reproduce muy bien los datos de concentración ϕ_i y $\phi(\mathbf{R}_i, T)$.

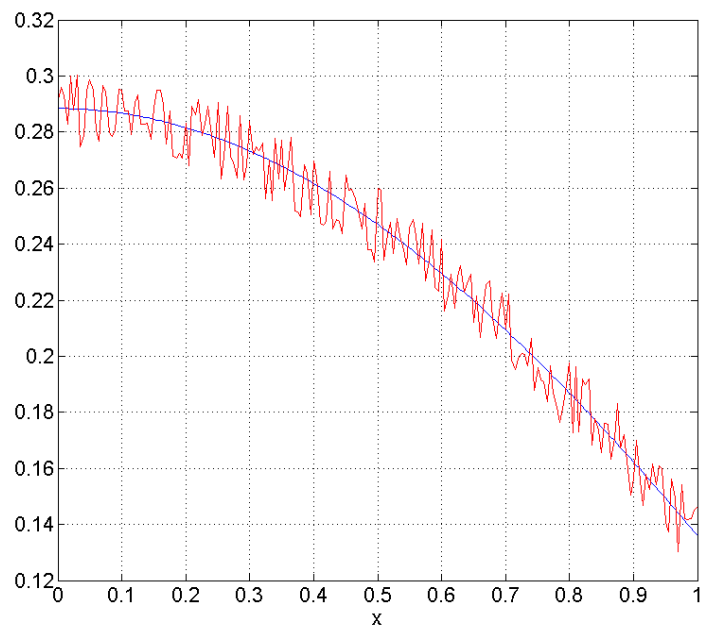


Fig. 5.15. Línea azul: concentración $\phi_\varepsilon(x, T)$ obtenida con $Q_\varepsilon(t)$; línea roja: datos sintéticos ϕ_i .

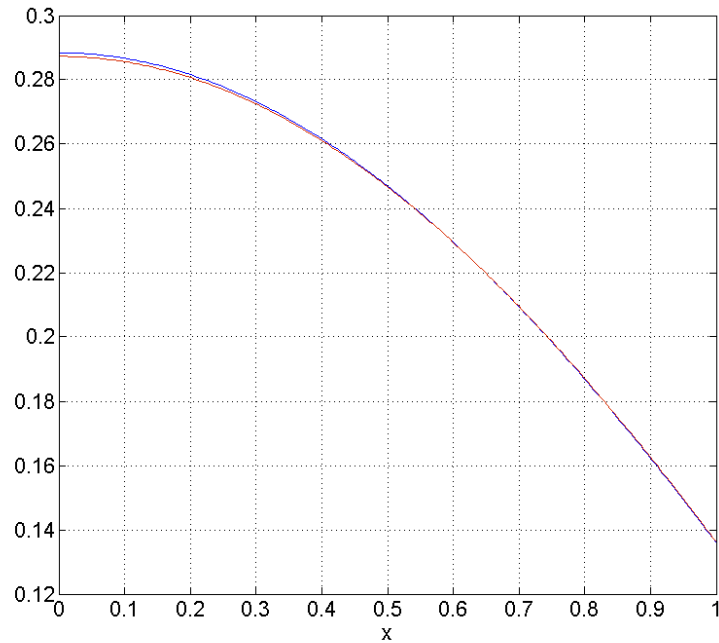


Fig. 5.16. Línea azul: concentración $\phi_\epsilon(x, T)$ obtenida con $Q_\epsilon(t)$; línea roja: datos exactos $\phi(\mathbf{R}_i, T)$.

Es decir, cuando se resuelve el modelo de dispersión (5.19)-(5.22) con la tasa $Q_\epsilon(t)$ entonces la concentración de la anomalía ϕ_ϵ que se obtiene al tiempo $t = T$ es la curva en color azul que observa en las figuras 5.15 y 5.16. Dicha función no tiene oscilaciones y presenta un error relativo con respecto a los datos exactos $\phi(\mathbf{R}_i, T)$ de 0.2%. Esto significa que el método de regularización tiene éxito tanto al filtrar los errores $\delta\phi_i$ como al reproducir los datos de concentración de la anomalía.

La explicación de por qué la funciones $Q_\epsilon(t)$ y $Q(t)$ son tan diferentes, aún cuando los datos sintéticos de la anomalía ϕ_i solo contienen un error del 3.5%, radica en la información útil que contienen dichos datos, y no en el número de ellos. Si consideramos la integral en el intervalo $(0, T)$ de la tasa de emisión $Q(t)$, entonces obtenemos la masa total M emitida en el dominio $\mathbf{D} = (0, \ell)$ por la fuente puntual, es decir,

$$M = \int_0^T Q(t)dt \quad (5.43)$$

Para la tasa $Q(t)$ definida por la ecuación (5.5) se tiene que $M = 42.16$. Por otra parte, la masa contenida en la concentración de la anomalía $\phi(x, T)$ se estima por la ecuación:

$$m_T = \int_0^\ell \phi(x, T) dx \quad (5.44)$$

En este ejemplo, los datos sintéticos ϕ_i contienen una masa $m_T = 0.2359$, es decir, la masa contenida en los datos representa solo el 0.56% de la masa total emitida. Por lo tanto, los datos sintéticos ϕ_i contienen menos del 1% de la historia de emisión de la fuente, por lo que el error real que introducen dichos datos en el problema inverso es mucho mayor que el de 3.5%. Tal incertidumbre en la información permite la existencia de muchas funciones de emisión que ajustan a los datos de concentración. La tasa $Q_\epsilon(t)$ que selecciona el método de regularización es una de tales funciones.

Es importante notar que la masa emitida por la fuente que no está contenida en los datos ϕ_i es la masa del contaminante que ha salido del dominio de estudio \mathbf{D} a través de la frontera abierta, o que se ha transformado (ver término $\sigma\phi$ en la ecuación (5.19)). Este tipo de pérdida de información para el problema inverso es típica al trabajar con datos espacialmente distribuidos de la concentración de un contaminante, para dominios acotados con frontera abierta y considerando tiempos grandes en el proceso de dispersión.

Otro elemento de incertidumbre en los datos ϕ_i es que estos no contienen información de la evolución de la concentración de la anomalía en el dominio \mathbf{D} para instantes $t < T$. Esta incertidumbre también contribuye a que existan muchas funciones de emisión que ajustan a los datos de concentración, pero que no corresponden a la tasa exacta $Q(t)$. Para verificar esta aseveración, se considera un ejemplo numérico donde la pérdida de masa por la frontera

es insignificante, anulando el primer elemento de incertidumbre. De esta forma, el segundo elemento descrito es el responsable de una pobre aproximación de la tasa de emisión.

Consideramos nuevamente el modelo en una dimensión (5.19)-(5.22), su correspondiente modelo adjunto (5.30)-(5.33) y la función de prueba $Q(t)$ definida por la ecuación (5.5). Los valores de los parámetros que cambian con respecto al ejemplo anterior son los siguientes: $\mu = 0.01$, $\ell = 4.0$ y $T = 3$. Además, se considera que $N = 800$, $\Delta x = \ell/N$ y $\mathbf{R}_i = i\Delta x$, $i = 1, 2, \dots, N$. La figura 5.17 muestra la anomalía de la concentración del contaminante $\phi(\mathbf{R}_i, T)$, mientras que la figura 5.18 muestra los datos sintéticos ϕ_i generados en forma similar a los del ejemplo anterior.

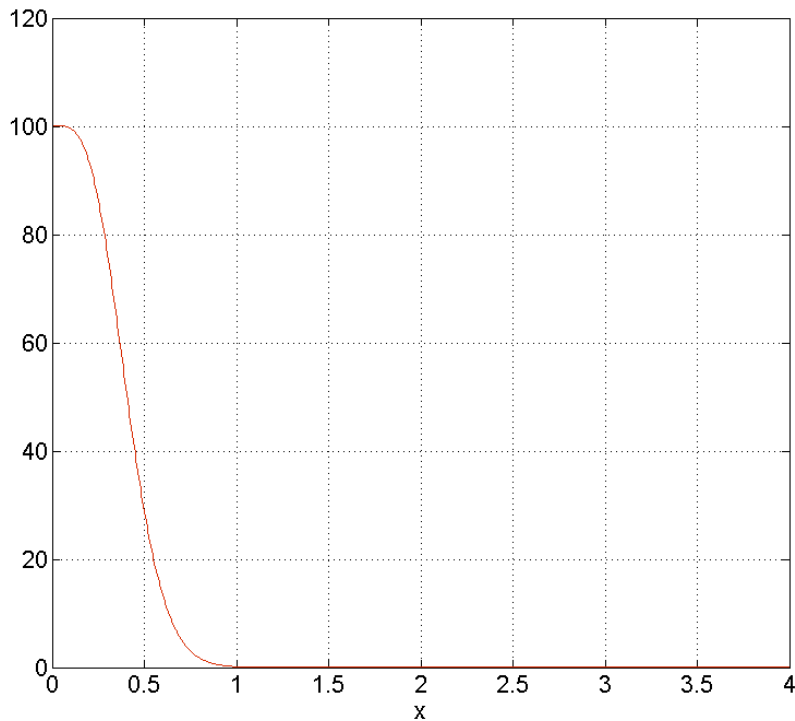


Fig. 5.17. Anomalía $\phi(\mathbf{R}_i, T)$ dada por la serie de Fourier-Fejér (5.26).

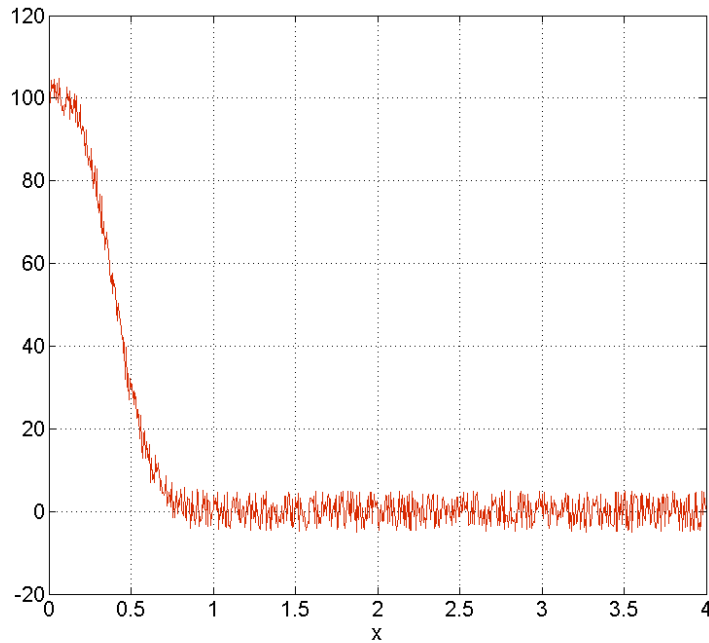


Fig. 5.18. Datos sintéticos para la anomalía de la concentración del contaminante ϕ_i , $i = 1, \dots, N$.

En este caso, la anomalía de la concentración $\phi(\mathbf{R}, T)$ contiene una masa $m_T = 42.1632$ de un total emitido $M = 42.1651$. Por lo tanto, la fracción de masa que ha salido del dominio de estudio a través de la frontera o que se ha transformado es despreciable.

La figura 5.19 muestra la solución regularizada $Q_\varepsilon(t)$ para $\varepsilon = \delta\phi = \max_i \{|\delta\phi_i|\}$. Como en el ejemplo anterior, tal solución se calcula resolviendo un problema de programación cuadrática. Se observa que $Q_\varepsilon(t)$ aproxima pobremente la tasa exacta $Q(t)$, ya que el error es del 58%. Sin embargo, la aproximación ha mejorado con respecto a la obtenida en el ejemplo anterior, donde el error es de 99%. La razón de tal mejora radica en que no ha habido pérdida de masa en el dominio de estudio.

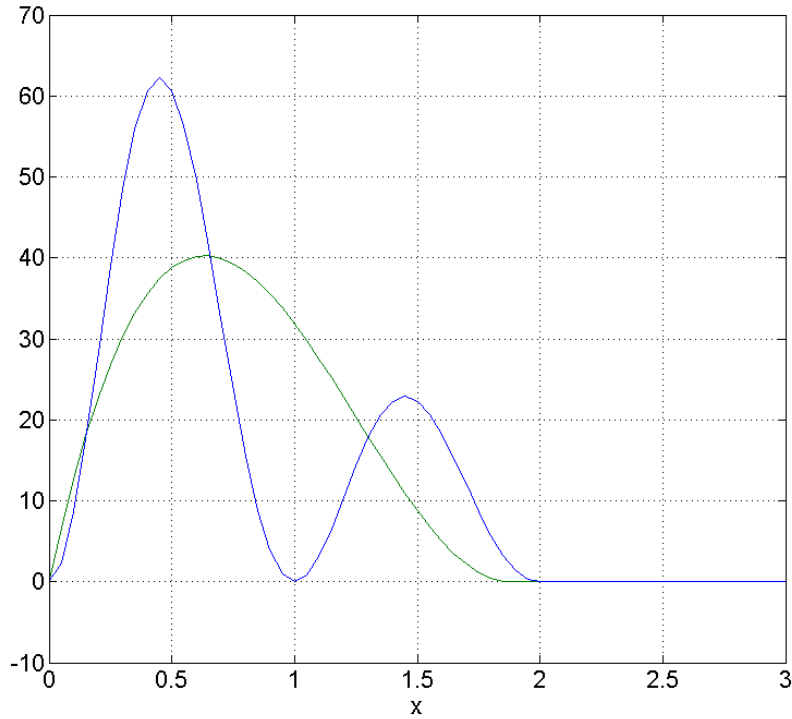


Fig. 5.19. Solución exacta $Q(t)$ (línea azul) y solución regularizada $Q_\varepsilon(t)$ (línea verde) obtenida para $\varepsilon = \delta\phi = \max_j \{|\delta\phi_j|\}$.

Las figuras 5.20 y 5.21 muestran que la tasa de emisión $Q_\varepsilon(t)$ reproduce muy bien los datos de concentración ϕ_i y $\phi(\mathbf{R}_i, T)$. Es decir, cuando se resuelve el modelo de dispersión (5.19)-(5.22) con la tasa $Q_\varepsilon(t)$ entonces la concentración de la anomalía ϕ_ε que se obtiene al tiempo $t = T$ es la curva en color azul que observa en las figuras 5.20 y 5.21. Dicha función no tiene oscilaciones y presenta un error relativo con respecto a los datos exactos $\phi(\mathbf{R}_i, T)$ de 0.9%. Esto significa que el método de regularización tiene éxito tanto al filtrar los errores $\delta\phi_i$ como al reproducir los datos de concentración de la anomalía.

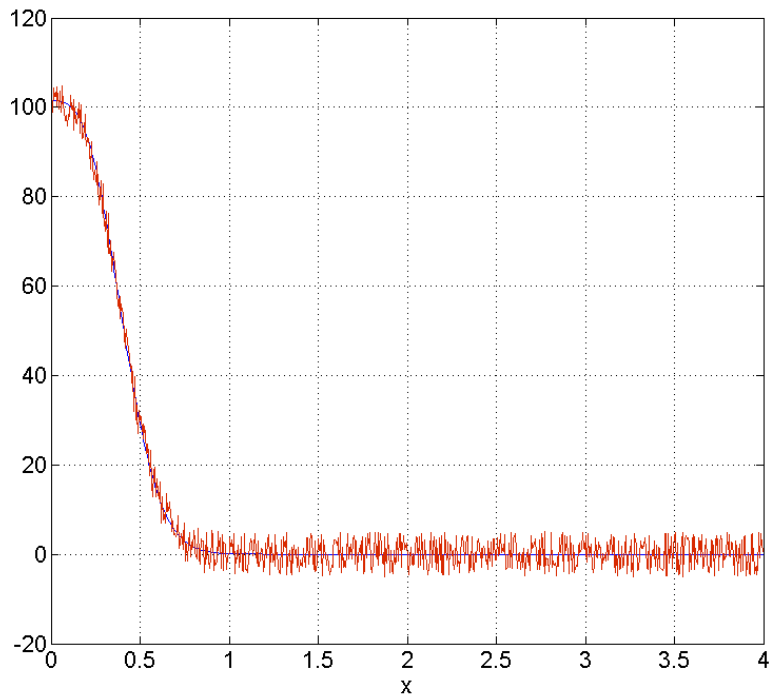


Fig. 5.20. Línea azul: concentración $\phi_\epsilon(x,T)$ obtenida con $Q_\epsilon(t)$; línea roja: datos sintéticos ϕ .

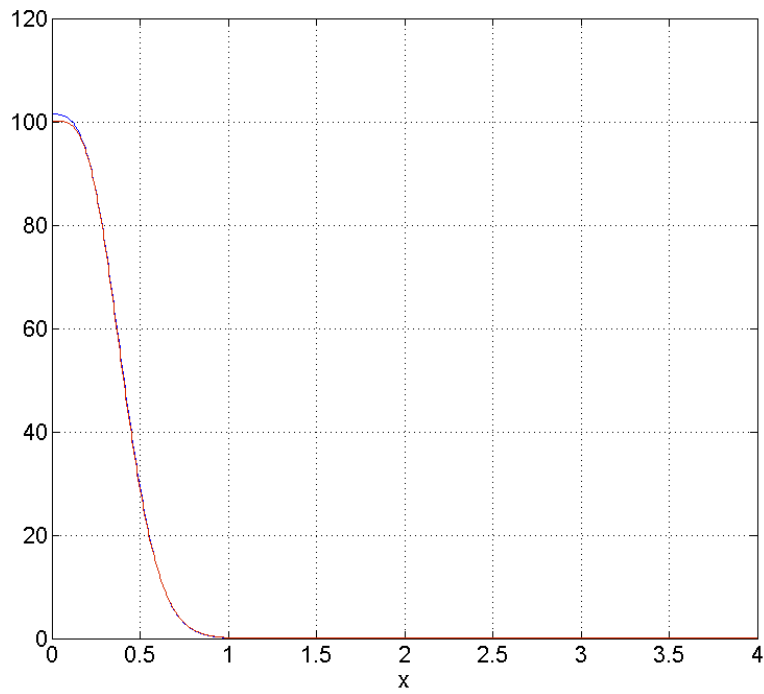


Fig. 5.21. Línea azul: concentración $\phi_\epsilon(x,T)$ obtenida con $Q_\epsilon(t)$; línea roja: datos exactos $\phi(\mathbf{R}_i, T)$.

Con el fin de mostrar que los factores de incertidumbre antes descritos son las causas de la pobre aproximación de la tasa de emisión $Q(t)$ que se obtiene por medio de datos espacialmente distribuidos, se considera la ecuación de balance de masa (5.23). Dicha ecuación relaciona la tasa de emisión con los valores de la anomalía ϕ en el dominio $\mathbf{D} = (0, \ell)$. Es decir,

$$Q(t) = \left[\zeta\phi(\ell, t) + \sigma \int_0^{\ell} \phi(x, t) dx \right] + \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{\ell} \phi(x, t) dx \quad (5.45)$$

De tal ecuación es claro que la tasa de emisión depende de la masa que se pierde en el proceso de dispersión y transformación química, fenómenos representados por los dos primeros términos del lado derecho de la ecuación (5.45), respectivamente; y por la razón de cambio, en cada tiempo $t < T$, de la integral de los valores espacialmente distribuidos de la anomalía de la concentración ϕ , proceso representado por el último término del lado derecho de la ecuación (5.45). En el primer ejemplo de esta sección los términos entre corchetes de la ecuación (5.45) representan un valor grande que no está contenido en los datos ϕ_i , y que equivale al 99% de la masa total emitida por la fuente. Además, los datos ϕ_i utilizados no contienen ninguna información de la contribución del último término en (5.45). De aquí que la recuperación de la tasa de emisión es defectuosa. En el segundo ejemplo de la sección la pérdida de masa es despreciable, es decir, el término entre corchetes es nulo. Por esta razón la recuperación de la tasa de emisión mejora, sin embargo, nuevamente los datos ϕ_i utilizados no contienen ninguna información de la contribución del último término en (5.45), ya que solo se usa información de la concentración en un instante: $\phi(x, T)$, de aquí que la aproximación de la tasa obtenida sea pobre.

Por último, es importante observar que la ecuación general de balance de masa (3.26) contiene términos similares a los de la ecuación particular (5.23). Por lo cual, se concluye que la recuperación de la tasa de emisión de una fuente puntual desconocida a través de datos espacialmente distribuidos de la anomalía de la concentración $\phi(x, T)$, no es posible,

ya que dichos datos carecen de la información de múltiples procesos. Tal resultado es independiente de la regularización del problema inverso utilizada.

Conclusiones

En esta tesis se ha propuesto un método inverso para estimar la tasa de emisión de una fuente puntual con base en datos de la concentración de un contaminante emitido a la atmósfera. Este método se ha formulado como un problema variacional cuya solución es la tasa de emisión no-estacionaria de la fuente contaminante. Se ha demostrado la existencia y la unicidad de dicha solución. El método inverso se puede aplicar tanto para una serie de tiempo de la anomalía de la concentración de un contaminante atmosférico, es decir, datos recabados en una estación de monitoreo, como para datos de la anomalía de la concentración distribuidos en un dominio a un tiempo fijo. Los resultados del método son diferentes con respecto a estos conjuntos de datos. Se obtiene un buen resultado en la recuperación de la tasa de emisión usando series de tiempo, mientras que se muestra que los datos espacialmente distribuidos no son viables para resolver el problema inverso. El funcional objetivo del problema variacional es la norma en el espacio de Hilbert L_2 de la primera derivada de la tasa de emisión. La minimización de dicho funcional filtra eficientemente los errores de alta frecuencia en los datos y reduce el fenómeno de inestabilidad presente en este problema inverso. Las restricciones en el problema variacional son ecuaciones integrales de Fredholm, las cuales relacionan explícitamente la tasa de emisión con los datos de concentración. El núcleo en tales ecuaciones integrales son las funciones adjuntas o de influencia, las cuales contienen información completa, en forma compacta, del proceso de dispersión del contaminante en la atmósfera.

Este método inverso se basa fuertemente en el uso de las funciones adjuntas y el principio de dualidad para estimar la concentración puntual de un contaminante. Sin embargo, en un contexto más general, hay que considerar que las estimaciones directa y adjunta de la concentración puntual o promedio de los contaminantes son equivalentes y complementarias en el estudio de los problemas de contaminación. La estimación directa, la cual utiliza la solución de la ecuación de dispersión, permite realizar un análisis de los niveles de contaminación en toda la región de estudio. Por otra parte, la estimación adjunta usa la solución de modelo adjunto de dispersión para estimar los niveles de contaminación

en puntos o subregiones. La ventaja de esta última estimación es que relaciona explícitamente las tasas de emisión y las condiciones iniciales de los contaminantes con las concentraciones promedio o puntuales de dichas sustancias. Esta característica permite establecer estrategias de control y de estimación de parámetros.

En particular, las estimaciones adjuntas de las concentraciones puntuales obtenidas en este trabajo permiten establecer fórmulas para estimar la tasa de emisión en dos casos particulares: cuando la tasa de emisión es constante y cuando la tasa de emisión representa un impulso en el tiempo, como en el caso de una explosión. El caso donde la tasa de emisión es no-estacionaria se resuelve con la formulación variacional, y como se ha explicado, las ecuaciones integrales sirven como restricciones de dicho problema.

Para complementar la formulación del método inverso se han descrito los modelos de dispersión directo y adjunto, y se ha probado que estos son problemas bien formulados. Se ha mostrado también que el problema discreto asociado al problema variacional es un sencillo problema de programación cuadrática, el cual se resuelve eficientemente con la rutina *quadprog* de MATLAB. Los experimentos numéricos de inversión de datos muestran que el parámetro de regularización óptimo es el máximo valor de los errores en los datos de la anomalía de la concentración. Con respecto al conjunto de datos que se han utilizado en los ejemplos numéricos de inversión se concluye que el uso de series de tiempo de la anomalía de la concentración, junto con la regularización propuesta del problema inverso, representa un procedimiento viable para la recuperación de la tasa de emisión de una fuente desconocida. Sin embargo, el uso de datos espacialmente distribuidos de la anomalía de la concentración no representa una buena fuente de información para estimar tasas de emisión, ya que como se mostró, tales datos carecen de información sobre ciertos procesos en el fenómeno de dispersión de los contaminantes en la atmósfera. Además, este resultado es independiente de la regularización del problema inverso que se utilice. Los ejemplos numéricos muestran también la existencia de regularizaciones y conjuntos de datos con los cuales es posible obtener funciones de emisión que, según el proceso de dispersión, ajustan bien a los datos utilizados, pero que no corresponden a la tasa real de emisión. Esto nos indica lo complejo que puede ser un problema inverso y la necesidad de analizar tales problemas minuciosamente.

Referencias

Aster, R. C., Borchers, B. & Thurber, C. H. (2013). *Parameter estimation and inverse problems*, Academic Press, Elsevier.

Bengtsson, L. (1980). On the use of a time sequence of surface pressures in four-dimensional data assimilation. *Tellus*, 30, 189-197.

Bolin, B. and Keeling, R. (1963). Large-scale atmospheric mixing as deduced from the seasonal and meridional variations of carbon dioxide. *J. Geophys. Res.*, 68, 3899-3920.

Brioude, J., Kim, S. K., Angevine, W. M., Frost, G. J., Lee, S. H., Mckeen, S. A., Trainer, M., Fehsenfeld, F. C. , Holloway, J. S., Ryerson, T. B., Williams, E. J., Petron, G. & Fast, J. D. (2011). Top-down estimate of anthropogenic emission inventories and their inter annual variability in Houston using a mesoscale inverse modeling technique, *Journal of Geophysical Research*, Vol. 16, D20305.

Broman, A. (1989). *Introduction to Partial Differential Equations: From Fourier Series to Boundary-Value Problems*. Dover Publications, Inc., NY.

Carslaw, H. S. (1952). *An introduction to the theory of Fourier's series and integrals*. Dover Publications, Inc., NY.

Charlson, R. (2001). *Extending atmospheric aerosol measurements to the global scale*, In: IGACTivities, NewLetters, Number 25 (<http://www.igac.unh.edu/>).

Cheney, E. W. (1966). *Introduction to Approximation Theory*, Chelsea Publishing Company, NY.

Coleman, T. F. & Li, Y. (1996). A reflective Newton method for minimizing a quadratic function subject to bounds on some of the variables. *SIAM Journal on Optimization*, 6 (4), 1040-1058.

Crank, J. & 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.

Dyke P. P. G. (2004). *An introduction to Laplace transforms and Fourier series*. Springer Undergraduate Mathematics Series, UK.

Elbern, H., H. Schmidt, O. Talagrand and A. Ebelb (2000). 4D-variational data assimilation with an adjoint air quality model for emission analysis, *Environmental Modelling and Software*, Volume 15, Issues 6-7, Pages 539-548.

Engl, H. W. (1995). *Inverse Problems*. Aportaciones Matemáticas, SMM, México.

Enting, I. G. (2002). *Inverse problems in atmospheric constituent transport*. Cambridge University Press, UK.

Enting, I. (1999). Green's function methods of tracer inversion. In: Prasad Kasibhatla, Martin Heimann, Peter Rayner, Natalie Mahowald, Ronald G. Prinn, and Dana E. Hartley (editors), *Inverse Methods in Global Biogeochemical Cycles*, AGU Geophysical Monograph Series, Vol. 114.

Enting, I. G. & Newsam, G. N. (1990). Atmospheric constituent inversion problems: Implications for baseline monitoring. *Journal of Atmospheric Chemistry*, 11, 69-87.

Fisher, M. and Larry, D. (1995). Lagrangian four-dimensional variational data assimilation of chemical species. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 121, 1681.

Fung, I., John, J., Lerner, J., Matthews, E., Prather, M., Steele, L., and Fraser, P. (1991). Three-dimensional model synthesis of the global methane cycle. *J. Geophys. Res.*, 96, 13011-13065.

Gill, P. E., Murray, W. & Wright, M. H. (1981). *Practical Optimization*, Academic Press, London, UK.

Glasko, V. B. (1984). *Inverse problems of mathematical physics*. American Institute of Physics (Translation Series), NY, USA.

Granier et al., (2002). Modeling. In. *The Changing Atmosphere: An Integration and Synthesis of a Decade of Tropospheric Chemistry Research*. Brasseur et al. (Eds.). Springer-Verlag.

Groetsch, C. W. (1993). *Inverse problems in the mathematical sciences*. Vieweg, Germany.

Gustafsson, N. (1997). *Data assimilation for numerical weather prediction systems - a 25 year perspective*, Doctoral dissertation, Department of Meteorology, Stockholm University. Julio 2002, 21 / 22.

Hadamard, J. (1923). *Lectures on Cauchy's problem in linear partial differential equations*. Yale University Press, New Haven, CT.

Holmes, M. H. (2007). *Introduction to numerical methods in differential equations*. Springer, Texts in Applied Mathematics, USA.

Islam, M. A. (1999). Application of a gaussian plume model to determine the location of an unknown emission source. *Water, Air and Soil Pollution*, 112, 241-245.

Kasibhatla, P., Heimann, M., Rayner, P., Mahowald, N., Prinn, R., and Hartley, D. (editors), (1999). *Inverse Methods in Global Biogeochemical Cycles*, AGU Geophysical Monograph Series, Vol. 114.

Kathirgamanathan, P., McKibbin, R. & McLachlan, R. I. (2003). Source release-rate estimation of atmospheric pollution from a non-steady point source-Part1: Source at a known location, *Res. Lett. Inf. Math. Sci.*, 5, 71-84.

Kreyszig, E. (2006). *Advanced engineering mathematics*, John Wiley and Sons, NJ, USA.

Kreyszig, E. (1989). *Introductory functional analysis with applications*. John Wiley & Sons, USA.

Liu, F., J. Zhu, F. Hu, Y. Zhang, An optimal weather condition dependent approach for emission planning in urban areas. *Environmental Modelling and Software*, Elsevier, 22, No. 4, 548-557, 2007.

Lushi, E. & Stockie, J. M. (2010). An inverse Gaussian plume approach for estimating atmospheric pollutant emissions from multiple sources. *Atmospheric Environment*, 44, 1097-1107.

Marchuk, G. I. (1995). *Adjoint equations and analysis of complex systems*, Kluwer, Dordrecht.

Marchuk, G. I. (1982). Mathematical issues of industrial effluent optimization. *J. Meteor. Soc.*, Japan, 60, 481-485.

Marchuk, G. I. (1986). *Mathematical Models in Environmental Problems*. Elsevier, New York.

Marchuk, G. I. and Yu. N. Skiba (1976). Numerical Calculation of the Conjugate Problem for a Model of the Thermal Interaction of the Atmosphere with the Ocean and Continents. *Izvestiya, Atmos. Ocean. Physics*, 12, 279-284.

Marchuk, G. I. (1975). Formulation of the theory of perturbations for complicated models. Part I: The estimation of the climate change. *Geofis. Int.*, 15, 103-156.

Marchuk, G. I. (1974). *The numerical solution of problems of atmospheric and oceanic dynamics*. Gidrometeoizdat, Leningrad, 304 pp.

Ménard, R. (1999). Tracer assimilation. In: Prasad Kasibhatla, Martin Heimann, Peter Rayner, Natalie Mahowald, Ronald G. Prinn, and Dana E. Hartley (editors), *Inverse Methods in Global Biogeochemical Cycles*, AGU Geophysical Monograph Series, Vol. 114.

Mesinger, F. and A. Arakawa (1982). *Numerical methods used in atmospheric models*. World Meteorological Organization, Garp Publications Series No. 17. 84 p.

Molteni, F., Buizza, R., Lanzingner, A., and Palmer, T. (1996). Potential use of the ECMWF ensemble prediction system: methodology and validation. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 122, 73-119.

Mulholland, M. & Seinfeld, J. H. (1995). Inverse air pollution modelling of urban-scale carbon monoxide emissions. *Atmospheric Environment*, 29 (4), 497-516.

Panofsky, H.. (1949). *Objective weather map analysis*. *J. Met.*, 6, 386-392.

Parra-Guevara, D. y Y. N. Skiba (2016). Recuperación de la tasa de emisión de una fuente contaminante: Análisis de la existencia, la unicidad y la estabilidad de las soluciones. *Información Tecnológica*. Vol. 27, No. 5 (en prensa).

Parra-Guevara, D., Y. N. Skiba and A. Reyes-Romero (2015). Existence and uniqueness of the regularized solution in the problem of recovery the non-steady emission rate of a point source: Application of the adjoint method. In: Proceedings of the International Conference on Engineering Optimization (ENGOPT 2014), *Engineering Optimization IV*, Rodrigues, H.C., et al. (eds.), pp. 181-186. CRC Press/Balkema, Taylor and Francis Group, London, UK.

Parra-Guevara, D. & Skiba, Yu N. (2013a). Adjoint Approach to Estimate the Non-Steady Emission Rate of A Point Source. *Int. Journal of Engineering Research and Applications*. Vol. 3, No. 6, pp. 763-776.

Parra-Guevara, D. & Skiba, Yu N. (2013b). A Linear-Programming-Based Strategy for Bioremediation of Oil-Polluted Marine Environments. *Environmental Modeling & Assessment*, Springer, Vol. 18, No. 2, pp. 135-146.

Parra-Guevara, D., Skiba, Y. N. & Arellano, F. N. (2011). Optimal assessment of discharge parameters for bioremediation of oil-polluted aquatic systems. *International Journal of Applied Mathematics*, 24 (5), 731-752.

Parra-Guevara, D. and Yu. N. Skiba (2011). Chapter 7: An Optimal Strategy for Bioremediation of Aquatic Systems Polluted by Oil. In: *Advances in Environmental Research* (Ed. J. A. Daniels), Vol. 15, 165-205. Nova Science Publishers, Inc., NY, USA.

Parra-Guevara, D., Skiba, Y. N. & Pérez-Sesma, A. (2010). A linear programming model for controlling air pollution. *International Journal of Applied Mathematics*, 23 (3), 549-569.

Parra-Guevara, D. and Yu. N. Skiba (2007). A Variational Model for the Remediation of Aquatic Systems Polluted by Biofilms. *International Journal of Applied Mathematics. Academic Publications*, 20 (7), 1005-1026.

Parra-Guevara, D. & Skiba, Y. N. (2006). On optimal solution of an inverse air pollution problem: Theory and numerical approach. *Mathematical and Computer Modelling*, Elsevier, 43 (7-8), 766-778.

Parra-Guevara, D. & Skiba, Y. N. (2003). Elements of the mathematical modelling in the control of pollutants emissions, *Ecological Modelling*, 167, 263-275.

Parra-Guevara, D. (2001). *Modelación matemática y simulación numérica en el control de emisiones industriales*. Tesis Doctoral, Posgrado en Ciencias de la Tierra, UNAM, México. 136 p.

Pudykiewicz, J. (1998). Application of adjoint tracer transport equations for evaluating source parameters. *Atmospheric Environment*, 32, 3039-3050.

Quélo, D., Sportisse, B., Berroir, J.P and Charpentier, I. (2002). Some remarks concerning inverse modeling and data assimilation for slow-fast atmospheric chemical kinetics, *Proceedings of APMS 2001*. Springer Geosciences, 499-513.

Rao, K. S. (2007). Source estimation methods for atmospheric dispersion. *Atmospheric Environment*, 41, 6964-6973.

Riesz, F. & B. Sz.-Nagy (1990). *Functional Analysis*. New York: Dover Publications.

Robertson, L. and Langner, J. (1998). Source function estimate by means of variational data assimilation applied to the ETEX-1 tracer experiment. *Atmos. Environ.* 32, 4219-4225.

Samarskii A. A. and P. N. Vabishchevich (2007). *Numerical methods for solving inverse problems of mathematical physics*. De Gruyter, Berlin, Germany.

Seibert P. (2001). Inverse modelling with a Lagrangian particle dispersion model: application to point releases over limited time intervals. In: Gryning, S. E., Schiermeier, F.A. (eds.): *Air Pollution Modeling and its Application XIV*. Proc. of ITM Boulder. New York: Plenum Press, 381-389.

Seibert, P., (1999). Inverse Modelling of Sulfur Emissions in Europe Based on Trajectories. In: Prasad Kasibhatla, Martin Heimann, Peter Rayner, Natalie Mahowald, Ronald G. Prinn, and Dana E. Hartley (editors), *Inverse Methods in Global Biogeochemical Cycles*, AGU Geophysical Monograph Series, Vol. 114, p. 147-154.

Seinfeld, J. H. & Pandis, S. N. (1998). *Atmospheric chemistry and physics. From air pollution to climate change*. Wiley-Interscience.

Shankar-Rao, K. (2007). Source estimation methods for atmospheric dispersion, *Atmospheric Environment*, 41, 6964-6973.

Skiba, Y. N. and D. Parra-Guevara (2015). *Application of adjoint equations to problems of dispersion and control of pollutants*. Nova Science Publishers, Inc., NY, 336 p.

Skiba, Yu. N. (2005). *Métodos y esquemas numéricos: Un análisis computacional*. DGPFE, UNAM, 440 p.

Skiba, Y. N. (2003). On a method of detecting the industrial plants which violate prescribed emission rates, *Ecological Modelling*, 159, (2-3), 125-132.

Skiba, Y. N. & Parra-Guevara, D. (2000). Industrial pollution transport. Part I: Formulation of the problem and air pollution estimates. *Environmental Modeling and Assessment*, 5, 169-175.

Skiba, Y. N. (1997). Air pollution estimates, *World Resource Review*, 9 (4), 542-556.

Skiba, Yu. N. and J. Adem (1995). A balanced and absolutely stable numerical thermodynamic model for closed and open oceanic basins. *Geofísica Internacional*, Vol. 34, No. 4.

Skiba, Y. N. (1993). Balanced and absolutely stable implicit schemes for the main and adjoint pollutant transport equations in limited area. *Rev. Intern. Contamin. Ambient.*, 9, 39-51.

Skiba, Yu. N. (1978). *Method of solving the atmosphere-ocean-soil thermal interaction problem on a basis of the adjoint equations*. Ph. D. Thesis, Computing Center, The USSR Academy of Sciences, Novosibirsk, 124 pp.

Tikhonov, A. N. & Arsenin, V. Y. (1977). *Solution of Ill-posed Problems*. Washington: Wins. & Sons.

Vautard, R., M. Beekmann and L. Menut (2000). Applications of adjoint modelling in atmospheric chemistry: sensitivity and inverse modelling. *Environmental Modelling and Software*, Elsevier, 15, 703-709.

Venkataraman, P. (2002). *Applied optimization with MATLAB programming*, J. Wiley and Sons, NY.

Vladimirov, V. S. & Marchuk, G. I. (2000). A definition of an adjoint operator for nonlinear problems, *Doklady Mathematics*, 61, 438-441.