



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

ESTIMACIÓN DE CONTAMINANTES  
USANDO UN MODELO DE DISPERSIÓN Y  
EL MÉTODO ADJUNTO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

CHRISTIAN ROBERTO LADRÓN DE  
GUEVARA REYES

TUTOR

DR. YURI NIKOLAEVICH SKIBA





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.

# Índice general

Introducción . . . . .	3
<b>1. Contaminantes ambientales</b>	<b>5</b>
1.1. Contaminantes atmosféricos . . . . .	5
1.2. Contaminantes en agua . . . . .	6
1.3. Fuentes de contaminantes . . . . .	7
1.4. Efectos en la salud . . . . .	8
1.5. Dispersión de contaminantes . . . . .	10
1.6. Descripción matemática . . . . .	10
<b>2. Transporte y difusión de contaminantes</b>	<b>12</b>
2.1. Problema de transporte unidimensional . . . . .	12
2.2. Modelo no estacionario de disipación . . . . .	15
2.3. Problema de difusión estacionario . . . . .	15
2.4. Problema de transporte y difusión estacionario . . . . .	17
2.5. Método de separación de variables . . . . .	19
2.5.1. Ecuación de difusión homogénea con condiciones de contorno homogéneas . . . . .	19
2.5.2. Ecuación de difusión no homogénea con condiciones de frontera homogéneas . . . . .	21
2.5.3. Ecuación de difusión con condiciones de frontera no homogéneas . . . . .	23
2.5.4. Ecuación de difusión con transporte y decaimiento . . . . .	24
2.6. Problema de transporte y difusión bidimensional . . . . .	25
2.6.1. Problema de transporte y difusión bidimensional con coeficientes constantes . . . . .	27
2.6.2. Ecuaciones integrales . . . . .	28
2.6.3. Fuentes de contaminación . . . . .	29
2.7. Unicidad y estabilidad de la solución en el sentido clásico . . . . .	29
<b>3. El método adjunto</b>	<b>33</b>
3.1. Espacio de Hilbert, identidad de Lagrange y operador adjunto . . . . .	33
3.1.1. Existencia del operador adjunto . . . . .	34
3.1.2. Unicidad del operador adjunto . . . . .	35

3.2. Modelo adjunto para el transporte de contaminantes . . . . .	35
3.2.1. Modelo con coeficientes constantes . . . . .	36
3.2.2. Modelo con coeficientes variables . . . . .	39
3.3. Principio de dualidad y particularidades de las estimaciones duales . .	40
3.4. Sensibilidad de las estimaciones . . . . .	44
<b>4. Aplicaciones del método adjunto en la estimación de la concentración de contaminantes</b>	<b>48</b>
4.1. Derrame de petróleo . . . . .	48
4.2. Estimación adjunta y respuesta del modelo de derrame de petróleo en dos dimensiones . . . . .	50
4.3. Aplicación de las estimaciones duales . . . . .	52
4.3.1. Búsqueda de la parte mas peligrosa en la ruta de un buque tanque	53
4.3.2. Propagación de petróleo con velocidad climática . . . . .	53
4.3.3. Dependencia de la concentración $J(\phi)$ respecto a $Q(t)$ . . . .	53
4.4. Impacto de emisiones vehiculares . . . . .	54
4.4.1. Monóxido de Carbono . . . . .	54
4.4.2. Modelo en dos dimensiones . . . . .	54
4.4.3. Solución del problema adjunto . . . . .	59
4.5. Detección de fábricas que violan tasas de emisión . . . . .	67
4.5.1. Tasas de emisión invariables . . . . .	69
4.5.2. Tasas de emisión variables . . . . .	70
4.5.3. Búsqueda de la mejor ubicación para una fábrica nueva . . . .	71
Conclusiones . . . . .	73
<b>Bibliografía</b>	<b>75</b>

## Introducción

La contaminación ambiental representa uno de los mayores problemas de salud pública, con efectos adversos muy difíciles de cuantificar. En este trabajo se introduce un modelo que describe la concentración de contaminantes considerando la dispersión, transporte causado por el viento, y decaimiento debido a fenómenos físicos y químicos.

El modelo analizado es descrito por una ecuación diferencial parcial, y se presentan algunos casos simples en una dimensión para los cuales se conoce una solución analítica, posteriormente se desarrolla un modelo bidimensional cuya solución general no se conoce, y es necesario aproximar numéricamente.

Posteriormente se formula su problema adjunto y se exploran sus propiedades matemáticas, útiles para estimar la concentración de contaminantes en una zona de interés utilizando menos recursos computacionales que el problema directo.

Al final se presentan ejemplos de su aplicación a problemas ambientales como: encontrar el punto en la ruta de un buque petrolero con mayor afectación en caso de un derrame, el impacto de cada avenida en la concentración de monóxido de carbono

emitido por automóviles en una zona de interés, la detección de una fábrica que viola las tasas de emisión normativas, o encontrar la ubicación de una fábrica que presenta un menor impacto en la concentración de un contaminante en una zona de interés.

# Capítulo 1

## Contaminantes ambientales

### 1.1. Contaminantes atmosféricos

Se define como contaminante atmosférico a *una sustancia que por medios naturales o antropogénicas se emite a la atmósfera, en cantidades tales que a corto, mediano, o largo plazo, ocasiona efectos negativos en los seres vivos, en los ecosistemas y en los materiales*[59]. Los eventos que liberan éstos contaminantes pueden ser naturales, como erupciones volcánicas, incendios forestales y procesos de fermentación anaeróbica, en los cuales se produce principalmente  $SO_2$ ,  $CO_2$ ,  $NO_x$ ,  $CH_4$ ,  $HCl$ ,  $NH_3$ ,  $H_2S$  y material particulado.

Las actividades humanas alteran el estado de la atmósfera de manera significativa, pues requieren cada vez más la transformación de materias primas y combustibles que depositan en el aire sus residuos[8]. Las actividades como ganadería, generación de electricidad, metalurgia, química, electrónica y tratamiento de residuos son un ejemplo, éstas actividades generan principalmente  $SO_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO_x$ ,  $CH_4$ ,  $HCl$ ,  $NH_3$ ,  $O_3$ ,  $H_2SO_4$ ,  $HNO_3$ ,  $Pb$ ,  $Cd$ ,  $Zn$ , hidrocarburos, etcétera[60].

La diferencia entre los efectos de fenómenos naturales que emiten estas sustancias y los fenómenos causados por actividades humanas, es que los primeros liberan grandes cantidades de contaminantes, pero en intervalos cortos y esporádicos, permitiendo que los mecanismos de asimilación del medio ambiente controlen el nivel del contaminante en el aire[43], un ejemplo de mecanismos de asimilación es la lluvia que deposita partículas contaminantes en el suelo, este efecto que también es causado por granizo, nieve, bruma o neblina es conocido como *sedimentación*[59].

En el segundo caso la liberación es constante por un tiempo muy prolongado, sobrepasando las capacidades de los mecanismos de asimilación y permitiendo la transformación de una porción del contaminante en contaminantes secundarios, que son contaminantes derivados de los emitidos directamente a la atmósfera[60].

Una lista con mas detalle de los contaminantes atmosféricos mas comunes es la siguiente[59]:

- *Esmog*. Se refiere a las condiciones de contaminación intensas, que causan una reducción significativa de la visibilidad en las ciudades, es la combinación de las

palabras *smoke* y *fog*.

- *Niebla Ligera ó Haze*. Se refiere a una reducción en la visibilidad, pero a diferencia del esmog no es una reducción tan intensa y es un fenómeno a una escala geográfica mayor.
- *Gases y partículas*. A la suspensión de una sustancia, ya sea gas, líquido o sólido en la atmósfera se le conoce como aerosol. Se pueden formar por condensación de gases generados por combustión, reacciones fotoquímicas, polvo debido a fragmentación de un sólido, etcétera. El humo, por ejemplo, es una mezcla de gases, gotas líquidas y partículas sólidas, producto de la combustión incompleta de un material orgánico. Las partículas sólidas son las que presentan una manifestación visible mayor en la atmósfera.
- *Dióxido de azufre ( $SO_2$ )*. Históricamente es el más prominente de los contaminantes, es un irritante respiratorio y es producido principalmente por volcanes y oxidación de gases sulfurosos, aunque éstas fuentes no afectan tanto a las poblaciones debido a su lejanía. Las poblaciones se ven afectadas por el  $SO_2$  generado en la combustión de carbón.
- *Dióxido de nitrógeno ( $NO_2$ )*. Es dañino para plantas y humanos, aunque no a las concentraciones que normalmente ocurren en la atmósfera, la propiedad interesante del  $NO_2$  es su color café anaranjado .
- *Monóxido de carbono ( $CO$ )*. Es un gas incoloro, inodoro e insípido, su propiedad más importante es que reduce la capacidad de transporte de oxígeno en la sangre. Es liberado por la combustión ineficiente de combustible, las fuentes estacionarias suelen estar diseñadas y ajustadas para emitir bajas cantidades de  $CO$ . Es generado principalmente por incendios forestales y la combustión en vehículos automotores, de hecho una tercera parte del carbono emitido por éstos es en forma de  $CO$  [24], y tiene un tiempo de residencia en la atmósfera de entre 2 y 4 meses [60], su cantidad en el aire limpio es de  $\approx 0.05 ppmv$  mientras que en una ciudad es común tener  $\approx 50 ppmv$ , y se pueden llegar a presentar  $\approx 140 ppmv$  [24].
- *Ozono ( $O_3$ )*. Es un constituyente normal de la atmósfera, debido a las influencias antropogénicas tiene dos funciones, en la estratósfera actúa como un filtro para la radiación ultravioleta, mientras que en la tropósfera es un contaminante. Es generado en la tropósfera por la reacción fotoquímica que convierte el  $NO$  a  $NO_2$ , así como por el transporte desde la estratósfera causado por corrientes en la frontera de éstas, fenómeno conocido como *tropopause folds* [40].

## 1.2. Contaminantes en agua

El 85 % de las aguas de desecho son vertidas a la franja costera, tanto en países desarrollados como subdesarrollados [23], volviendo al océano el *basurero del mundo*, ya que

recibe descargas de sustancias químicas, desechos radiactivos, basura, petróleo además de sedimentos de la atmósfera [59].

Los mares y ríos han sido utilizados tradicionalmente como medio de evacuación de los desperdicios humanos, y los ciclos biológicos del agua aseguraban su biodegradación debido a la acción de bacterias y algas. Actualmente la acción de éstas se ve excedida por la gran cantidad de desechos, y la adición a éstos de contaminantes químicos[59]. Por ejemplo: desechos industriales o derrames de petróleo.

Las fuentes de contaminante que emiten de forma localizada en un punto se llaman fuentes puntuales: un buque, una planta de tratamiento, o la desembocadura de un río. Cuando la liberación del contaminante no se localiza en un punto en específico se habla de fuentes difusas, como son la deposición atmosférica, que deposita en el agua los contaminantes que están suspendidos en el aire, o las filtraciones de lluvia en el suelo, que alcanzan arroyos y tributarios que llegan a ríos lagos, humedales y aguas costeras[59].

Los contaminantes encontrados en el agua se pueden agrupar en contaminantes físicos, químicos y biológicos[59].

- *Contaminantes físicos.* Son contaminantes sólidos o líquidos insolubles en el agua que afectan su aspecto e interfieren con la flora y fauna acuática; como espumas, residuos oleaginosos, o calor.
- *Contaminantes químicos.* Contaminantes químicos. Incluyen orgánicos e inorgánicos, los primeros son los desechos humanos, o de origen agrícola o animal que consumen el oxígeno disuelto en el agua y afectan la vida en el agua; los inorgánicos son productos de origen industrial como sulfatos, nitratos y carbonatos. En el segundo caso, algunos de ellos provocan prácticamente la destrucción de los ecosistemas acuáticos, como los metales pesados, plaguicidas, cianuros, arsénicos e hidrocarburos.
- *Contaminantes biológicos.* Incluyen hongos, bacterias, algas y virus. No todos resultan nocivos, algunos pueden degradar otros contaminantes.

### 1.3. Fuentes de contaminantes

Existen diversos criterios para clasificar a las fuentes de contaminantes ambientales[59].

- *Según su origen.* Se clasifican en fuentes de contaminación generada por causas naturales y en fuentes de contaminación generadas por actividades humanas (contaminación antropogénica).
- *Según su ubicación.* Se clasifican en fuentes móviles, como automóviles y aviones; o en fuentes estáticas, como fábricas, desembocaduras de ríos o tierras de cultivo.
- *Según su forma.* Se clasifican en fuentes difusas, puntuales, lineales y superficiales; las primeras corresponden a fuentes cuya ubicación es difícil de identificar, como la deposición atmosférica, filtraciones de lluvia al subsuelo o emisiones

de tierras de cultivo. Las fuentes puntuales, lineales y superficiales son aquellas cuya ubicación y distribución es fácilmente identificable, como un buque, una erupción volcánica, o un incendio forestal.

Otra clasificación es en fuentes directas o indirectas, las primeras emiten directamente los contaminantes a la atmósfera, mientras las segundas propician que otras fuentes directas las emitan, como centros comerciales o estadios, que aglomeran muchos automóviles que funcionan como fuentes directas [59].

#### **1.4. Efectos en la salud**

La contaminación en agua representa un grave problema para la población humana, pues la presencia de contaminantes no necesariamente se puede detectar por su sabor y olor, se necesitan pruebas químicas para su detección. Un grave problema para la salud humana son los derivados de petróleo absorbidos por la fauna y flora marinas, que se transmiten a sus consumidores.

El 95% del volumen total de contaminantes en la atmósfera en forma regional y a mediano plazo es debido a 5 contaminantes:  $CO$ ,  $SO_2$ ,  $NO_x$ , hidrocarburos, ozono y material particulado[43][2]. La cantidad de éstos contaminantes se utiliza como *índice de la calidad del aire*.

Para cada contaminante se define una norma sanitaria, que consiste en la concentración máxima admisible de el contaminante, que depende de su toxicidad, y un intervalo de tiempo máximo de exposición a la contaminación, la tabla 1.1 muestra las concentraciones límite de los 6 contaminantes principales de acuerdo a la Norma Oficial Mexicana.

Contaminante	Dato base utilizado para la evaluación	Valor límite del indicador con el que se evalúa	Criterio de suficiencia anual	Norma Oficial Mexicana
CO	Promedio móvil de 8 horas	9.0 ppm 10,000µg/m <sup>3</sup>	Se requiere tener al menos 6 de las 8 horas con concentraciones válidas.	NOM-021-SSA1-2021[15]
	Promedio horario	26.0 ppm 30,000µg/m <sup>3</sup>	Se requiere al menos el 75% de las concentraciones por minuto válidas en una hora (45 registros).	
NO <sub>2</sub>	Promedio anual	0.021 ppm 40µg/m <sup>3</sup>	Se requiere al menos el 75% de las concentraciones horarias válidas en el año.	NOM-023-SSA1-2021[14]
	Promedio horario	0.106 ppm 200µg/m <sup>3</sup>	Se requiere al menos el 75% de las concentraciones por minuto válidas en una hora (45 registros).	
SO <sub>2</sub>	Promedio aritmético de los percentiles 99 de los máximos diarios por 3 años consecutivos	0.075 ppm 196.5µg/m <sup>3</sup>	Se requiere que todos los trimestres tengan al menos 75% de máximos del día reportados	NOM-022-SSA1-2019[13]
	Máximo de los promedios de 24 horas durante 3 años	0.04 ppm 104.8µg/m <sup>3</sup>	Se requiere que todos los trimestres tengan al menos 75% de promedios por día reportados	
Material particulado PM10	Promedio aritmético de 24 horas	70µg/m <sup>3</sup> cambia gradualmente a 50µg/m <sup>3</sup> en 2027	Se requiere un mínimo de 75% de las 24 horas reportadas	NOM-025-SSA1-2021[12]
	Promedio aritmético anual	36µg/m <sup>3</sup> cambia gradualmente a 20µg/m <sup>3</sup> en 2027	Se requiere al menos tres trimestres del año tengan al menos 75% de promedios por día reportados	
Material particulado PM2.5	Promedio aritmético de 24 horas	41µg/m <sup>3</sup> cambia gradualmente a 25µg/m <sup>3</sup> en 2027	Se requiere un mínimo de 75% de las 24 horas reportadas	
	Promedio aritmético anual	10µg/m <sup>3</sup>	Se requiere al menos tres trimestres del año tengan al menos 75% de promedios por día reportados	
O <sub>3</sub>	Promedio móvil de 8 horas	0.065ppm 127µg/m <sup>3</sup> cambia gradualmente a 0.051ppm 100µg/m <sup>3</sup> en 2027	Se requiere tener al menos 6 de las 8 horas con concentraciones válidas.	NOM-020-SSA1-2021[16]
	Promedio horario	0.090ppm 176µg/m <sup>3</sup>	Se requiere al menos el 75% de las concentraciones por minuto válidas en una hora (45 registros).	

Tabla 1.1: Normas sanitarias

Los efectos de éstos contaminantes en la salud son conocidos para altas concentraciones en grandes cantidades en intervalos de tiempo cortos, pero no se conocen sus efectos en concentraciones bajas en intervalos de tiempo de años. Por ejemplo, experimentos con animales demuestran que concentraciones de 2 partes por millón de ozono durante 3 horas son letales [2], pero no se conocen los efectos de estar expuesto por años a las 0.1 partes por millón que se presentan en periodos de hasta 8 horas en un episodio de smog fotoquímico.

También es desconocido el efecto de la coexistencia de varios contaminantes a la vez, que puede generar mayores daños a los causados por ambos contaminantes de forma separada, por ejemplo la exposición a dióxido de azufre y particulado sólido a la que se le atribuyen 4,000 muertes en Londres en diciembre de 1952 [60].

## 1.5. Dispersión de contaminantes

La capacidad de la atmósfera para transportar contaminantes ha sido excedida por las actividades humanas, dando como resultado niveles altos de contaminación. La dispersión y transporte de los contaminantes depende de los fenómenos meteorológicos locales, como rapidez y dirección del viento, turbulencia y estabilidad atmosférica; así como de la topografía de la región, se enlistan los principales conceptos asociados al problema de dispersión de contaminantes[59].

- *Advección*. Es el transporte de contaminante debido al viento, la cantidad de contaminante dispersado aumenta con la velocidad del viento y también con la variabilidad de su dirección.
- *Dispersión*. Es el crecimiento de una pluma contaminante hacia los alrededores libres de contaminante causado por la turbulencia atmosférica.
- *Turbulencia mecánica*. Es la turbulencia generada por el flujo del aire sobre obstáculos como cultivos, árboles, construcciones y montañas; su presencia es mayor conforme aumenta la velocidad del viento. Si la mayor parte de la turbulencia es originada por éstos obstáculos se dice que la atmósfera es neutral o se encuentra en un estado de estabilidad neutral.
- *Turbulencia convectiva*. Es la turbulencia formada por el aire que se calienta al contacto con el suelo y se eleva por convección.
- *Sedimentación y precipitaciones*. La principal causa de disminución en la concentración de fondo de los contaminantes en la atmósfera es debido a la sedimentación, es decir que se depositan en el suelo tanto por la atracción gravitacional como por la lluvia, nieve, o granizo que descienden junto con las partículas contaminantes.

## 1.6. Descripción matemática

El problema de la concentración de contaminantes se define como un problema probabilístico, donde la concentración  $\phi$  de un contaminante es una variable aleatoria, pues es función de factores que se definen como variables aleatorias, como las meteorológicas o las fuentes de emisión de contaminante.

Es posible obtener modelos determinísticos simplificando el problema mediante promedios de variables aleatorias, suponer que las variables aleatorias cumplen con una función de densidad de probabilidad, idealizar condiciones atmosféricas, del contaminante, y de las fuentes que lo emiten[59].

La concentración de contaminante promedio en un punto se expresa mediante la función  $\phi(\vec{x}, t)$  para la posición  $\vec{x}$  al tiempo  $t$ , ésta expresión es conocida como *expresión euleriana*, pues describe la concentración en función de la posición y el tiempo, y para cada tiempo  $t$  la concentración medida no corresponde a las mismas partículas.

Existe también la *expresión lagrangiana*, en la cual el sistema se describe por un parámetro que representa a una partícula, puede ser por ejemplo la posición inicial  $\vec{a}$

de la partícula. En ésta expresión la posición  $\vec{x} = \vec{x}(\vec{a}, t)$  es función del parámetro que identifica a la partícula y el tiempo.

Una función  $q(\vec{x}, t)$  que en la expresión euleriana sólo es función de posición y tiempo se conoce como *variable de campo*, en la descripción lagrangiana se expresa como

$$q(\vec{x}(\vec{a}, t), t) = q(\vec{a}, t)$$

Entonces la velocidad  $\vec{u}$  de la partícula del elemento material con posición inicial  $\vec{a}$  es

$$\vec{u} = \frac{d\vec{x}(\vec{a}, t)}{dt} = \left( \frac{\partial \vec{x}(\vec{a}, t)}{\partial t} \right)_{\vec{a}}$$

La expresión lagrangiana de  $\vec{u}(\vec{x}, t)$  expresa la velocidad instantánea del elemento material que está en la posición  $\vec{x}$  al tiempo  $t$ .

## Capítulo 2

# Transporte y difusión de contaminantes

### 2.1. Problema de transporte unidimensional

Un problema sencillo de dispersión de contaminantes es la ecuación de transporte por advección unidimensional, la concentración de contaminante en un punto se representa por la función  $\phi(x, t)$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (2.1)$$

donde  $u$  es la velocidad del fluido, la cual se supone constante, y en donde está inmerso (o disuelto) el contaminante. Se añade al problema la condición inicial

$$\phi(x, 0) = f(x), x \in [0, 1]$$

y se define  $D = \{0 < x < 1; 0 < t < 1\}$  como el dominio de  $\phi$ . donde  $f(x)$  es una función diferenciable, mediante el método de las características se puede encontrar la solución

$$\phi(x, t) = f(x - ut)$$

sustituyendo en el problema se confirma que es solución[59].

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial(x-ut)} \frac{\partial(x-ut)}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial(x-ut)} \frac{\partial(x-ut)}{\partial x} = 0$$

Entonces, la solución es constante sobre las líneas características

$$x - ut = x_0$$

$$\phi(x, y) = f(x_0) = \text{const}$$

de forma que siguiendo las características partiendo desde las condiciones iniciales, se puede generar la solución  $\phi$ , como se muestra en la figura 2.1

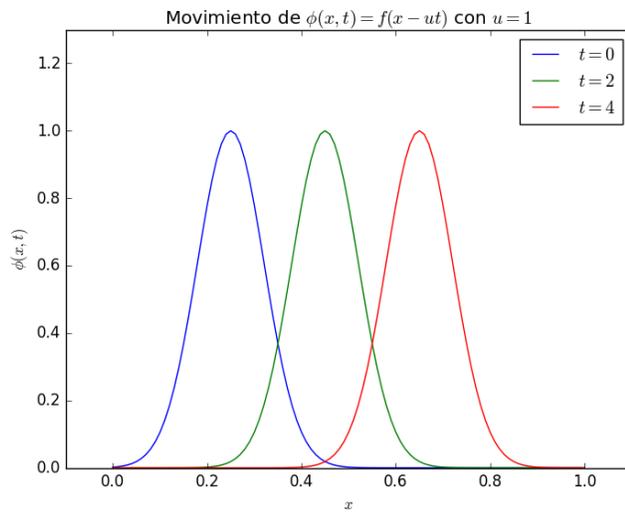


Figura 2.1

Las condiciones iniciales  $f(x)$  no son suficientes para definir la solución en todo el dominio, pues se divide por la recta  $x - ut = 0$ , en la figura 2.2 hace falta definir una condición  $\phi(0, t) = g(t)$  para definir la solución en la región gris.

Si  $u = u(x, t)$  es variable, entonces es difícil hallar la solución analítica y hay que usar un método numérico[59].

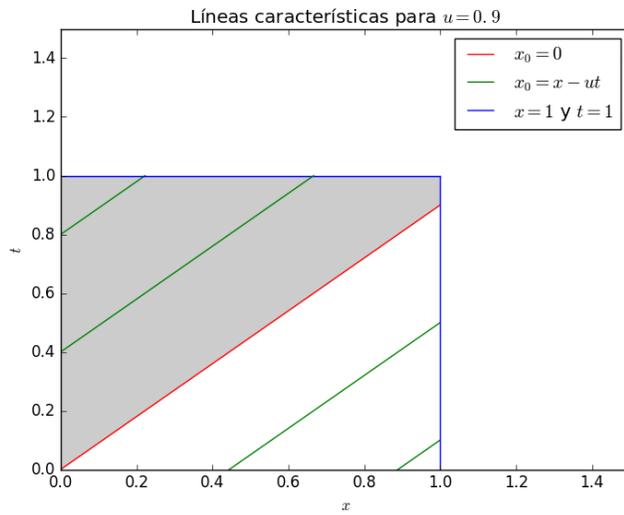


Figura 2.2

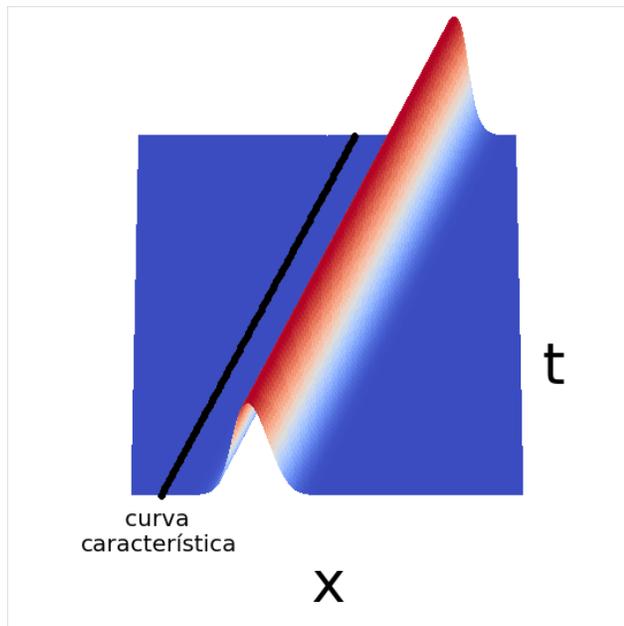


Figura 2.3: Representación en una superficie del transporte de condiciones iniciales descritas en la figura 2.1, la profundidad representa el valor de  $\phi$  el eje horizontal representa  $x$  y el vertical representa  $t$

## 2.2. Modelo no estacionario de disipación

El modelo mas simple que describe el proceso no estacionario de disipación de una sustancia, cuya concentración se da por la función  $\phi(t)$ , se plantea con la ecuación diferencial

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \sigma \phi = f \quad (2.2)$$

Con condiciones iniciales

$$\phi(x, 0) = \phi_0(x)$$

Donde  $f$  es una función que representa una fuente de contaminantes, si ésta es constante en el tiempo se obtiene la solución de la ecuación diferencial ordinaria no homogénea

$$\phi = \phi_0 e^{-\sigma t} + \frac{f}{\sigma} (1 - e^{-\sigma t})$$

Éste modelo solo representa el cambio proporcional a la concentración del contaminante, y la solución es un decaimiento exponencial con amortiguación proporcional a  $\sigma$ , no describe las principales características de propagación del contaminante, pero es razonable para describir el proceso de sedimentación de partículas en la atmósfera[59].

## 2.3. Problema de difusión estacionario

Considerando el problema de difusión estacionario con disipación sin fenómeno de transporte

$$\sigma \phi = \mu \frac{d^2 \phi}{dx^2} + f \quad (2.3)$$

$$f = Q \delta(x - x_0)$$

Donde  $\mu = cte.$  es el coeficiente de difusión [29],  $x_0$  es la posición de la fuente de intensidad  $Q$ , usando la hipótesis de que la función es acotada se imponen las condiciones de frontera

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \phi(x) = 0$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \phi(x) = 0$$

Integrando la ecuación en  $[x_0 - \varepsilon, x_0 + \varepsilon]$

$$\sigma \int_{x_0 - \varepsilon}^{x_0 + \varepsilon} \phi dx = \mu \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x_0 + \varepsilon} - \mu \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x_0 - \varepsilon} + Q$$

En el límite  $\varepsilon \rightarrow 0$  la ecuación se vuelve

$$\mu \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x_0 + 0} - \mu \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x_0 - 0} + Q = 0 \quad (2.4)$$

Separando el problema en las dos regiones donde  $f = 0$  obtenemos dos problemas de la forma

$$\mu \frac{d^2 \phi}{dx^2} - \sigma \phi = 0 \quad (2.5)$$

uno en el dominio  $x \in (-\infty, x_0]$  con la condición  $\lim_{x \rightarrow -\infty} \phi = 0$ , y escribimos su solución como  $\phi_-$  el otro en  $x \in [x_0, \infty)$  con la condición  $\lim_{x \rightarrow \infty} \phi = 0$  y escribimos su solución como  $\phi_+$

Para utilizar la relación 2.4 definimos

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x_0^+} = \frac{d\phi_+}{dx}$$

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x_0^-} = \frac{d\phi_-}{dx}$$

Y suponiendo continuidad en todo el dominio  $-\infty < x < \infty$  es necesario

$$\phi_+(x_0) = \phi_-(x_0)$$

Las respectivas soluciones están dadas por

$$\begin{aligned} \phi_+ &= C_+ e^{-\sqrt{\sigma/\mu}(x-x_0)} \\ \phi_- &= C_- e^{-\sqrt{\sigma/\mu}(x_0-x)} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Sustituyendo éstas soluciones en la ecuación 2.5 y resolviendo el sistema lineal de ecuaciones respecto a  $C_-$  y  $C_+$  obtenemos

$$C_- = C_+ = \frac{Q}{2\sqrt{\sigma\mu}}$$

Entonces la siguiente función es solución al problema 2.3, la gráfica de una solución se muestra en la figura 2.4.

$$\phi(x) = \frac{Q}{2\sqrt{\sigma\mu}} \begin{cases} e^{-\sqrt{\sigma/\mu}(x-x_0)} & \text{para } x \geq x_0 \\ e^{-\sqrt{\sigma/\mu}(x_0-x)} & \text{para } x \leq x_0 \end{cases} \quad (2.7)$$

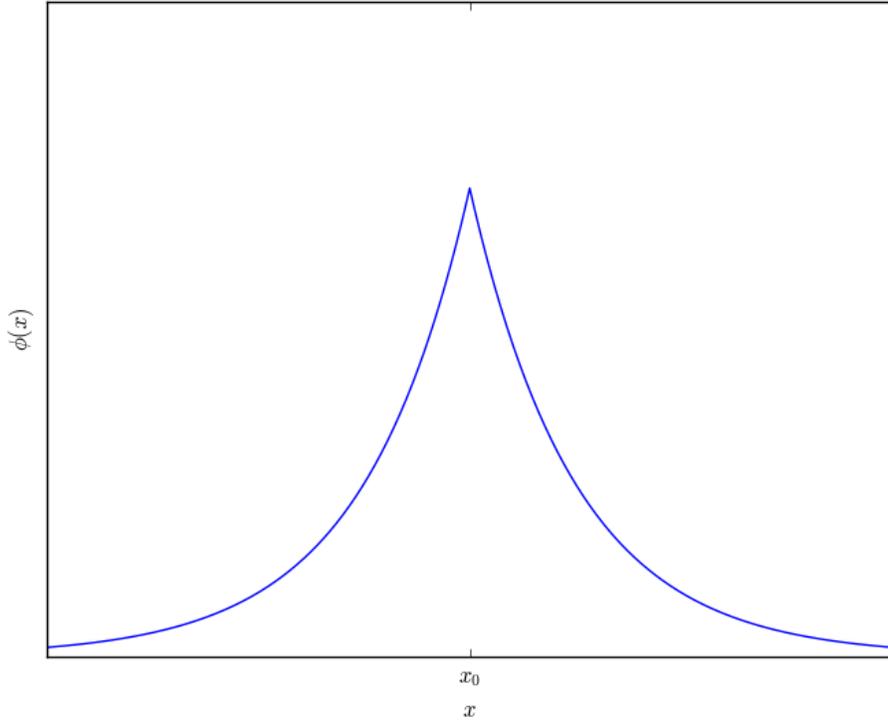


Figura 2.4: Solución al problema de difusión estacionario, ecuación 2.3

## 2.4. Problema de transporte y difusión estacionario

Añadiendo un término de transporte por el viento

$$u \frac{d\phi}{dx} + \sigma\phi = \mu \frac{d^2\phi}{dx^2} + f \quad (2.8)$$

$$f = Q\delta(x - x_0)$$

donde  $u = cte$  es la velocidad del viento, de la misma manera que en el problema anterior se separa el problema en dos problemas[59]

$$\mu \frac{d^2\phi_+}{dx^2} - \sigma\phi_+ = 0, \quad x \in [x_0, \infty), \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \phi_+ = 0 \quad (2.9)$$

$$\mu \frac{d^2\phi_-}{dx^2} - \sigma\phi_- = 0, \quad x \in (-\infty, x_0], \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} \phi_- = 0$$

Con las relaciones

$$\mu \frac{d\phi_+}{dx} - \mu \frac{d\phi_-}{dx} + Q = 0 \quad (2.10)$$

$$\phi_+(x_0) = \phi_-(x_0)$$

Las soluciones a éstos problemas tienen la forma

$$\begin{aligned} \phi_+ &= C_+ \exp \left\{ - \left( \sqrt{\frac{\sigma}{\mu} + \frac{u^2}{4\mu^2}} - \frac{u}{2\mu} \right) (x - x_0) \right\}, & x \geq x_0 \\ \phi_- &= C_- \exp \left\{ - \left( \sqrt{\frac{\sigma}{\mu} + \frac{u^2}{4\mu^2}} + \frac{u}{2\mu} \right) (x_0 - x) \right\}, & x \leq x_0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Y sustituyendo en las relaciones 2.10 obtenemos[29]

$$C_+ = C_- = \frac{Q}{\sqrt{4\sigma\mu + \mu^2}}$$

Y la solución queda como

$$\phi(x) = \frac{Q}{\sqrt{4\sigma\mu + \mu^2}} \begin{cases} \exp \left[ - \left( \sqrt{\frac{\sigma}{\mu} + \frac{u^2}{4\mu^2}} - \frac{u}{2\mu} \right) (x - x_0) \right], & x \geq x_0 \\ \exp \left[ - \left( \sqrt{\frac{\sigma}{\mu} + \frac{u^2}{4\mu^2}} + \frac{u}{2\mu} \right) (x_0 - x) \right], & x \leq x_0 \end{cases} \quad (2.12)$$

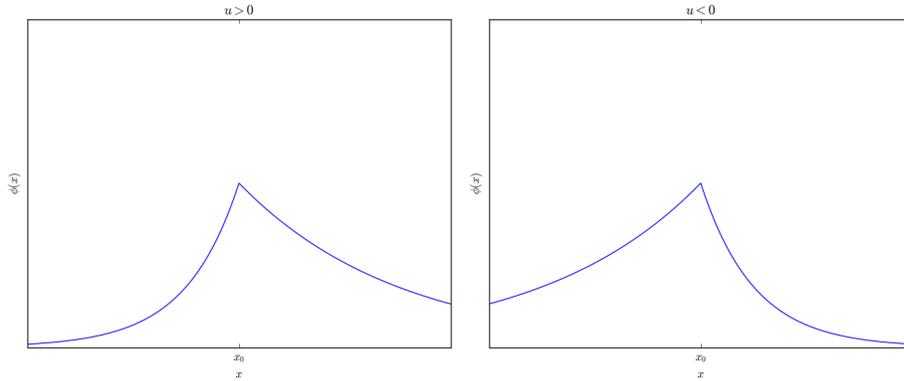


Figura 2.5: Solución al problema de transporte y difusión estacionario con  $u > 0$  y  $u < 0$  respectivamente, ecuación 2.8

Si la velocidad del viento  $u$  cambia, la concentración del contaminante se puede encontrar con la interpolación lineal

$$\phi(x) = \frac{\tau_1}{\tau_1 + \tau_2} \phi_1(x) + \frac{\tau_2}{\tau_1 + \tau_2} \phi_2(x)$$

Donde  $\phi_1$  es la solución durante el primer intervalo de tiempo  $\tau_1$  y  $\phi_2$  es la solución durante el segundo intervalo de tiempo  $\tau_2$ [59].

## 2.5. Método de separación de variables

La ecuación de difusión no estacionaria está clasificada como ecuación diferencial parabólica, y describe la propagación de una sustancia debido a la difusión, o la redistribución de la temperatura en un medio o cuerpo por conducción del calor. En el caso unidimensional la ecuación tiene la forma[59]

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \mu(x,t) \frac{\partial \phi}{\partial x} + f(x,t) \quad (2.13)$$

Para resolver éste problema hay que usar un método numérico [55], pero si el coeficiente de difusión se considera constante, entonces la ecuación de difusión puede expresarse como

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + f(x,t) \quad (2.14)$$

### 2.5.1. Ecuación de difusión homogénea con condiciones de contorno homogéneas

Considerando el problema 2.14 con las condiciones

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} & 0 < x < l, 0 < t \leq \tau \\ \phi(x, 0) &= \phi(x) & 0 \leq x \leq l \\ \left. \begin{aligned} \phi(0, t) &= 0 \\ \phi(l, t) &= 0 \end{aligned} \right\} & 0 \leq t \leq \tau \end{aligned} \quad (2.15)$$

Se busca la solución  $\phi(x,t)$  en el dominio  $0 < x < l, 0 < t \leq \tau$ , se busca una solución como el producto de dos funciones

$$\phi(x,t) = X(x)T(t)$$

Sustituyendo en 2.15

$$X(x)T'(t) = \mu X''(x)T(t)$$

Dividiendo entre  $\mu X(x)T(t)$

$$\frac{T'(t)}{\mu T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = -\lambda, \quad \lambda = const.$$

$\lambda$  es constante, pues es igual a una función de  $x$  y a una función de  $t$ , que son variables independientes. Este problema se separa en dos ecuaciones diferenciales ordinarias

[59]

$$\begin{aligned} X''(x) + \lambda X(x) &= 0 \\ T'(t) + \mu \lambda T(t) &= 0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

Tomando las condiciones de contorno  $\phi(0,t) = X(0)T(t) = 0$  y  $\phi(l,t) = X(l)T(t) = 0$  para cualquier  $0 \leq t \leq \tau$  entonces  $X(0) = X(l) = 0$ . Entonces se debe resolver el problema de Sturm-Liouville[59]

$$\begin{aligned} X''(x) + \lambda X(x) &= 0 \\ X(0) = 0, \quad X(l) &= 0 \end{aligned} \quad (2.17)$$

No hay una función real distinta de cero que satisfaga el problema para  $\lambda \leq 0$ , entonces se restringe a  $\lambda > 0$ , y la solución al problema es

$$X(x) = C_1 \cos(\sqrt{\lambda}x) + C_2 \operatorname{sen}(\sqrt{\lambda}x) \quad (2.18)$$

Imponiendo las condiciones 2.15  $X(0) = 0$  implica  $C_1 = 0$  y  $X(l) = 0$  implica

$$X(l) = C_2 \operatorname{sen}(\sqrt{\lambda}l) = 0$$

Entonces para cumplir  $\operatorname{sen}(\sqrt{\lambda}l) = 0$  es necesario

$$\sqrt{\lambda}l = \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\lambda_n = \left( \frac{\pi n}{l} \right)^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

Por lo tanto el problema tiene las soluciones

$$X_n(x) = C_n \operatorname{sen} \left( \frac{\pi n}{l} x \right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.19)$$

Resolviendo la otra ecuación diferencial

$$T'(t) + \mu \left( \frac{\pi n}{l} \right)^2 T(t) = 0$$

Se obtienen como soluciones

$$T_n(t) = D_n \exp \left\{ -\mu \left( \frac{\pi n}{l} \right)^2 t \right\}, \quad D_n = \text{const}$$

Todos los productos de funciones  $T_n$  y  $X_n$  son soluciones del problema 2.15

$$\phi_n(x,t) = X_n(x)T_n(t) = C_n \operatorname{sen} \left( \frac{\pi n}{l} x \right) \exp \left( -\mu \left( \frac{\pi n}{l} \right)^2 t \right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.20)$$

Como el problema 2.15 es una ecuación lineal y sus condiciones de contorno son homogéneas, cualquier combinación lineal de éstas es solución del problema. Entonces la siguiente suma es solución

$$\phi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \operatorname{sen} \left( \frac{\pi n}{l} x \right) \exp \left( -\mu \left( \frac{\pi n}{l} \right)^2 t \right) \quad (2.21)$$

Cuyas constantes  $C_n$  se obtienen al imponer la condición inicial  $\phi(x, 0)$ , que debe ser continua por intervalos [3].

$$\phi(x, 0) = \phi_0(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \operatorname{sen} \left( \frac{\pi n}{l} x \right)$$

Entonces los números  $C_n$  son los coeficientes de Fourier de la condición inicial, y se calculan, mediante la relación

$$C_n = \frac{2}{l} \int_0^l \phi_0(\xi) \operatorname{sen} \left( \frac{\pi n}{l} \xi \right) d\xi, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Puede demostrarse que cada término cumple con la ecuación, y por las condiciones de frontera se puede hacer la diferenciación término por término de la serie, por lo que la suma converge a la solución al problema [20], además el factor exponencial hace que  $\lim_{t \rightarrow \infty} \phi(x, t) = 0$ , según el principio del máximo, la solución  $\phi(x, t)$  puede tomar los valores extremos en  $t = 0$  o en  $x = 0$  o  $x = l$  [17].

### 2.5.2. Ecuación de difusión no homogénea con condiciones de frontera homogéneas

Considerando el problema 2.14 con las condiciones

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + f(x, t) & 0 < x < l, 0 < t \leq \tau \\ \phi(x, 0) &= 0 & 0 \leq x \leq l \\ \left. \begin{aligned} \phi(0, t) &= 0 \\ \phi(l, t) &= 0 \end{aligned} \right\} & 0 \leq t \leq \tau \end{aligned} \quad (2.22)$$

Las funciones  $X_n(x) = \operatorname{sen} \left( \frac{n\pi}{l} x \right)$  son funciones propias del operador  $L = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$  y forman una base ortogonal [3], de forma que podemos expresar las funciones  $\phi$  y  $f$  de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \phi(x, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x, t) \\ f(x, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} f_n(x, t) \\ \phi_n(x, t) &= X_n(x) T_n(t) \\ f_n(x, t) &= X_n(x) F_n(t) \\ X_n(x) &= \operatorname{sen} \left( \frac{\pi n}{l} x \right) \end{aligned} \quad (2.23)$$

Y dado que  $\phi$  y  $f$  son continuas, y con condiciones de contorno homogéneas, se pueden diferenciar término a término [20]

$$\begin{aligned}\frac{\partial \phi_n(x,t)}{\partial t} &= \frac{\partial^2 \phi_n(x,t)}{\partial x^2} + f_n(x,t) \\ X_n(x)T_n'(t) &= X_n''(x)T_n(t) + F_n(t)X_n(x)\end{aligned}\quad (2.24)$$

Usando las propiedades de las funciones propias

$$X_n'' = -\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 X_n(x)$$

Sustituyendo en 2.24

$$X_n(x)T_n'(t) = -\mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 X_n(x)T_n(t) + X_n(x)F_n(t)$$

Dividiendo entre  $X$

$$T_n' = -\mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 T_n(t) + F_n(t)\quad (2.25)$$

Resolvemos la ecuación 2.25 mediante el método de variación de constantes, resolvemos la ecuación con  $F_n = 0$

$$\begin{aligned}T_n'(t) &= -\mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 T_n(t) \\ T_n(t) &= D \exp\left(-\mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t\right)\end{aligned}\quad (2.26)$$

Cambiando la constante  $D$  por una función de tiempo  $D(t)$ , y sustituyendo en 2.25

$$\begin{aligned}D_n'(t) \exp\left(-\mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t\right) - \mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 \exp\left(-\mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t\right) D_n(t) &= -\mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 \exp\left(-\mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t\right) D_n(t) + F_n(t) \\ \implies D_n'(t) \exp\left(-\mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t\right) &= F_n(t)\end{aligned}$$

Integrando esta ecuación

$$D_n(t) = \int F_n(\tau) \exp\left(\mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 \tau\right) d\tau + C_n$$

Sustituyendo en 2.26

$$T_n(t) = \left(\int F_n(\tau) \exp\left(\mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 \tau\right) d\tau + C_n\right) \exp\left(-\mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 t\right)$$

Al imponer la condición inicial  $\phi(x,0) = 0$  se exige  $T(0) = 0$ , lo que implica que  $C_n = 0$ , y metiendo el factor exponencial a la integral del término que queda

$$T_n(t) = \int F_n(\tau) \exp\left(-\mu \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 (t - \tau)\right) d\tau$$

Ahora, usando la ortogonalidad de las funciones propias  $X(x)$  se pueden estimar los coeficientes  $F_n(\tau)$  [3].

$$F_n(\tau) = \frac{2}{l} \int_0^l f(\xi, \tau) \operatorname{sen} \left( \frac{\pi n}{l} \xi \right) d\xi$$

Sustituyendo las funciones  $X_n$  y  $T_n$  en la solución general[59]

$$\begin{aligned} \phi(x, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} X_n(x) T_n(t) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \int_0^t e^{-\mu \left( \frac{\pi n}{l} \right)^2 (t-\tau)} \left\{ \frac{2}{l} \int_0^l f(\xi, \tau) \operatorname{sen} \left( \frac{\pi n}{l} \xi \right) d\xi \right\} d\tau \right] \operatorname{sen} \left( \frac{\pi n}{l} x \right) \end{aligned} \quad (2.27)$$

De la misma forma que en la subsección 2.5.1, las condiciones de frontera permiten hacer la diferenciación término a término de la serie [20] para validar que es una solución del problema.

### 2.5.3. Ecuación de difusión con condiciones de frontera no homogéneas

Considerando el problema 2.14 con las condiciones

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + f(x, t) \quad 0 < x < l, 0 < t \leq \tau \\ \phi(x, 0) &= \phi(x) \quad 0 \leq x \leq l \\ \left. \begin{aligned} \phi(0, t) &= k_1(t) \\ \phi(l, t) &= k_2(t) \end{aligned} \right\} \quad 0 \leq t \leq \tau \end{aligned} \quad (2.28)$$

Utilizando los mismos métodos que en los problemas anteriores, se descompone la solución  $\phi$  en una suma de funciones  $\tilde{\phi}$  y  $\Phi$

$$\begin{aligned} \phi(x, t) &= \tilde{\phi}(x, t) + \Phi(x, t) \\ \tilde{\phi}(x, 0) &= \phi(x, 0) - \Phi(x, 0) = \varphi(x) - \Phi(x, 0) \\ \tilde{\phi}(0, t) &= 0 \\ \tilde{\phi}(l, t) &= 0 \end{aligned} \quad (2.29)$$

Buscamos a  $\Phi$  de la forma

$$\begin{aligned} \Phi(x, t) &= Ax + b \\ \Phi(0, t) &= b = k_1(t) \\ \Phi(l, t) &= Al + k_1(t) = k_2(t) \\ \implies A &= \frac{k_2(t) - k_1(t)}{l} \\ \implies \Phi(x, t) &= \frac{k_2(t) - k_1(t)}{l} x + k_1(t) \end{aligned} \quad (2.30)$$

Sustituyendo la suma de  $\tilde{\phi}$  y  $\Phi$  en la ecuación original obtenemos

$$\begin{aligned}\tilde{\phi}_t &= \mu \tilde{\phi}_{xx} + f(x,t) - \frac{k_2'(t) - k_1'(t)}{l} x - k_1'(t) \\ \tilde{\phi}(x,0) &= \varphi(x) - \frac{k_2(0) - k_1(0)}{l} x - k_1(0) \\ \tilde{\phi}(0,t) &= 0 \\ \tilde{\phi}(l,t) &= 0\end{aligned}\tag{2.31}$$

Que es la ecuación de difusión no homogénea con condiciones de contorno homogéneas, cuya solución es la ecuación 2.27, entonces la solución al problema es[59]

$$\phi(x,t) = \tilde{\phi}(x,t) + \frac{k_2(t) - k_1(t)}{l} x + k_1(t)\tag{2.32}$$

#### 2.5.4. Ecuación de difusión con transporte y decaimiento

En el caso de  $\mu, \sigma, u$  constantes se puede encontrar una ecuación de calor equivalente al problema

$$\begin{aligned}\frac{\partial \phi}{\partial t} &= \mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \sigma \phi + f(x,t) \\ x &\in [0, l], t \in [0, T] \\ \phi(x,0) &= g(x) \\ \phi(0,t) &= k_1(t) \\ \phi(l,t) &= k_2(t)\end{aligned}\tag{2.33}$$

Definimos una nueva función  $\varphi$  mediante el cambio de variable

$$\varphi = e^{[-\frac{u}{2\mu}x + (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]}\tag{2.34}$$

Por la regla de la derivada de un producto

$$\begin{aligned}\frac{\partial \phi}{\partial t} &= e^{[\frac{u}{2\mu}x - (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]} \left( -\frac{u^2}{4\mu} - \sigma \right) \varphi + e^{[\frac{u}{2\mu}x - (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \\ \frac{\partial \phi}{\partial x} &= e^{[\frac{u}{2\mu}x - (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]} \left( \frac{u}{2\mu} \right) \varphi + e^{[\frac{u}{2\mu}x - (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} &= e^{[\frac{u}{2\mu}x - (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]} \left( \frac{u^2}{4\mu^2} \right) \varphi + e^{[\frac{u}{2\mu}x - (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]} \frac{u}{\mu} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + e^{[\frac{u}{2\mu}x - (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}\end{aligned}$$

Sustituyendo estas ecuaciones en la ecuación 2.33 dividida entre  $e^{[\frac{u}{2\mu}x - (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]}$

$$\left( -\frac{u^2}{4\mu} - \sigma \right) \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \mu \left( \frac{u^2}{4\mu^2} \varphi + \frac{u}{\mu} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right) - u \left( \frac{u}{2\mu} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) - \sigma \varphi + \frac{f(x,t)}{e^{[\frac{u}{2\mu}x - (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]}}$$

Agrupando por el orden de la derivada

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi}{\partial t} &= \left( \frac{u^2}{4\mu} + \sigma + \frac{u^2}{4\mu} - \frac{u^2}{2\mu} - \sigma \right) \varphi + (u-u) \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{f(x,t)}{e^{[\frac{\mu}{2\mu}x - (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]}} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= \mu \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{f(x,t)}{e^{[\frac{\mu}{2\mu}x - (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]}}\end{aligned}$$

Entonces existe el problema equivalente a 2.33, y se puede resolver usando las técnicas mostradas en las subsecciones 2.5.1, 2.5.2 y 2.5.3

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi}{\partial t} &= \mu \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{f(x,t)}{e^{[\frac{\mu}{2\mu}x - (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]}} \\ x &\in [0, l], t \in [0, T] \\ \varphi(x, 0) &= e^{[-\frac{\mu}{2\mu}x]} g(x) \\ \varphi(0, t) &= e^{[(\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]} k_1(t) \\ \varphi(l, t) &= e^{[-\frac{\mu}{2\mu}l + (\sigma + \frac{u^2}{4\mu})t]} k_2(t)\end{aligned}\tag{2.35}$$

## 2.6. Problema de transporte y difusión bidimensional

Ahora consideraremos el problema de transporte y difusión en dos dimensiones descrito por las ecuaciones [59]

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi + \vec{U}(\vec{r}, t) \cdot \nabla \phi + \sigma(\vec{r}, t) \phi - \nabla \cdot \mu(\vec{r}, t) \nabla \phi = f(\vec{r}, t)\tag{2.36}$$

$$f(\vec{r}, t) = \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)\tag{2.37}$$

$$\vec{r} \in D \subset \mathbb{R}^2, \quad t \in [0, T]\tag{2.38}$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial n} - U_n \phi = 0 \quad \text{en } S^-\tag{2.39}$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad \text{en } S^+\tag{2.40}$$

$$\phi(\vec{r}, 0) = \phi_0\tag{2.41}$$

Donde  $\phi(\vec{r}, t)$  es la concentración del contaminante en la posición  $\vec{r}$  del dominio bidimensional  $D$  al tiempo  $t$ , la frontera del dominio  $S$  está dividida en dos partes  $S^+$  y  $S^-$  que se explicarán más adelante,  $\vec{U}(\vec{r}, t)$  es la velocidad del viento, este vector puede representar vientos climáticos (estacionarios o mensuales), o vientos determinados mediante un modelo dinámico [59] que satisface la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot \vec{U}(\vec{r}, t) = 0\tag{2.42}$$

$\sigma$  es el parámetro de decaimiento por procesos físicos y químicos (deposición, descomposición química, etc),  $\mu(\vec{r}, t) > 0$  es el coeficiente de difusión y  $\vec{r}_i$  es la posición de una fuente con tasa de emisión  $Q_i$

Sea  $S$  la frontera del dominio, el flujo de contaminante en la frontera está definido por la expresión [57]

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial n} - U_n \phi$$

Dividiremos la frontera en dos partes,  $S^-$  es la parte donde el viento *entra* al dominio, o la proyección de  $\vec{U}$  con la normal es negativa ( $U_n = \vec{U} \cdot \hat{n}$ ), mientras que  $S^+$  es la parte donde  $U_n$  es positiva

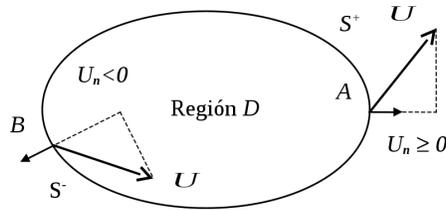


Figura 2.6: Separación de la frontera  $S$  en dos partes:  $S^+$  corresponde a los puntos de la frontera donde el viento sale de la región  $D$  ( $U_n > 0$ ), mientras  $S^-$  corresponde a los puntos de la frontera donde el viento entra a la región  $D$  ( $U_n < 0$ ),  $U_n$  está dado por la proyección de  $\vec{U}$  en la dirección del vector normal a la superficie

Ésto para definir las siguientes condiciones de frontera descritas en 2.40 y 2.39 [45], las cuales servirán para simplificar el problema y utilizar el método adjunto más adelante.

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial \phi}{\partial n} - U_n \phi &= 0 \quad \text{en } S^- \\ \mu \frac{\partial \phi}{\partial n} &= 0 \quad \text{en } S^+ \end{aligned}$$

La condición 2.39 nos dice que el flujo de contaminante es 0 en la frontera donde el aire entra, ésto se explica con el hecho de que no hay fuentes de contaminante fuera del dominio  $D$ , y la condición 2.40 dice que el flujo debido al fenómeno de difusión es despreciable en la parte  $S^+$  de la frontera donde el viento sale. Con éstas condiciones al hacer  $\mu = 0$  junto con 2.39 implica que  $\phi = 0$  en  $S^-$ , y si se impone  $\mu = \sigma = 0$ , se obtiene el problema de advección pura, que no requiere condiciones de frontera en  $S^+$ , pues la solución se determina con el método de alas características [59].

Éstas condiciones nos permiten que el problema esté bien planteado en el sentido de Hadamard[21]

### 2.6.1. Problema de transporte y difusión bidimensional con coeficientes constantes

De forma similar a lo mostrado en la ecuación 2.35 cuando los coeficientes  $\mu, \sigma, \vec{U}$  son constantes se puede reducir el problema 2.36 a la ecuación de calor en dos dimensiones, proponiendo el cambio de variable

$$\varphi = e^{[-\frac{U_x}{2\mu}x - \frac{U_y}{2\mu}y + (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \phi$$

Calculando las parciales de  $\phi$  en términos de  $\varphi$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \left( -\frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu} - \sigma \right) \varphi + e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \\ \frac{\partial \phi}{\partial x} &= e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \left( \frac{U_x}{2\mu} \right) \varphi + e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} &= e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \left( \frac{U_x^2}{4\mu^2} \right) \varphi + e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \left( \frac{U_x}{\mu} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial x} + e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} &= e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \left( \frac{U_y}{2\mu} \right) \varphi + e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} &= e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \left( \frac{U_y^2}{4\mu^2} \right) \varphi + e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \left( \frac{U_y}{\mu} \right) \frac{\partial \varphi}{\partial y} + e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \end{aligned}$$

Y la derivada direccional para las condiciones de frontera

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial n} &= \nabla \phi \cdot \hat{n} = \left[ \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] \cdot \hat{n} = e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \left[ \frac{U_x}{2\mu} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right] \cdot \hat{n} \\ &= e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \left( \frac{\vec{U}}{2\mu} \varphi + \nabla \varphi \right) \cdot \hat{n} = e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \left( \frac{U_n}{2\mu} \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right) \end{aligned}$$

Sustituyendo en la ecuación 2.36 y dividiendo entre  $e^{[\frac{U_x}{2\mu}x + \frac{U_y}{2\mu}y - (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]}$  obtenemos el problema equivalente

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \mu \nabla^2 \varphi &= h(\vec{r}, t) \\ h(\vec{r}, t) &= e^{[-\frac{U_x}{2\mu}x - \frac{U_y}{2\mu}y + (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \\ \mu \frac{\partial \varphi}{\partial n} - \frac{U_n}{2} \varphi &= 0 \quad \text{en } S^- \\ \mu \frac{\partial \varphi}{\partial n} + \frac{U_n}{2} \varphi &= 0 \quad \text{en } S^+ \\ \varphi(\vec{r}, 0) &= e^{[-\frac{U_x}{2\mu}x - \frac{U_y}{2\mu}y]} \phi_0 \\ \vec{r} \in D \subset \mathbb{R}^2, \quad t &\in [0, T] \end{aligned} \tag{2.43}$$

## 2.6.2. Ecuaciones integrales

Usando la propiedad

$$\nabla \cdot (\phi \vec{U}) = \phi \nabla \cdot \vec{U} + \vec{U} \cdot \nabla \phi \quad (2.44)$$

Integrando el segundo término de 2.36 sobre el dominio  $D$  y aplicando la propiedad 2.42

$$\int_D \vec{U} \cdot \nabla \phi = \int_D \nabla \cdot (\phi \vec{U}) - \int_D \phi \nabla \cdot \vec{U} = \int_D \nabla \cdot (\phi \vec{U})$$

Usando el teorema de la divergencia y separando en frontera de entrada y de salida

$$\int_D \nabla \cdot (\phi \vec{U}) = \int_S \phi U_n = \int_{S^-} \phi U_n + \int_{S^+} \phi U_n \quad (2.45)$$

Ahora integrando el cuarto término de 2.36 y usando el teorema de la divergencia

$$\int_D \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) = \int_S \mu \frac{\partial \phi}{\partial n}$$

Separando en frontera de entrada y frontera de salida, aplicando las condiciones de frontera 2.39 y 2.40

$$\int_S \mu \frac{\partial \phi}{\partial n} = \int_{S^+} \mu \frac{\partial \phi}{\partial n} + \int_{S^-} \mu \frac{\partial \phi}{\partial n} = \int_{S^-} \phi U_n \quad (2.46)$$

De forma que la contribución del segundo y cuarto término de 2.36 es igual a la diferencia de 2.45 y 2.46

$$\int_D \vec{U} \cdot \nabla \phi - \int_D \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) = \int_{S^+} \phi U_n \quad (2.47)$$

Sustituyendo 2.47 en la integral sobre  $D$  de la ecuación 2.36

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi d\vec{r} = \sum_{i=1}^N Q_i(t) - \int_D \sigma \phi d\vec{r} - \int_{S^+} U_n \phi dS \quad (2.48)$$

Ésta es la ecuación de balance de la masa total del contaminante [59]

Si multiplicamos por  $\phi$  la ecuación 2.36 e integramos sobre  $D$ , usando 2.44 en el término de advección y el de difusión, el teorema de la divergencia y las ecuaciones 2.42, 2.39 y 2.40

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi^2 d\vec{r} = 2 \sum_{i=1}^N Q_i(t) \phi - 2 \int_D (\sigma \phi^2 + \mu |\nabla \phi|^2) d\vec{r} - \int_{S^+} U_n \phi^2 dS + \int_{S^-} U_n \phi^2 dS \quad (2.49)$$

Reescribiendo el miembro derecho en términos de la norma de  $\phi$

$\|\phi\|^2 = \int_D \phi^2 d\vec{r}$  y dado que  $U_n < 0$  en  $S^-$  y  $U_n > 0$  en  $S^+$

$$\frac{\partial}{\partial t} \|\phi\|^2 = 2 \sum_{i=1}^N Q_i(t) \phi - 2 \int_D (\sigma \phi^2 + \mu |\nabla \phi|^2) d\vec{r} - \int_S |U_n| \phi^2 dS \quad (2.50)$$

Entonces el cambio en la concentración total del contaminante, así como en la norma de la solución aumenta respecto a las emisiones  $Q$  y decrece respecto a  $\sigma$  y  $\mu$ . En el caso ideal  $U_n = \sigma = \mu = 0$  y sin fuentes de contaminante ( $Q_i(t) = 0$ ) las parciales de las integrales respecto al tiempo son cero

$$\frac{\partial}{\partial t} \|\phi\|^2 = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi d\vec{r} = 0$$

Estas relaciones son muy útiles para probar algoritmos y programas computacionales [46].

### 2.6.3. Fuentes de contaminación

La función  $f(\vec{r}, t)$  que se ha utilizado para un número  $N$  de fuentes en posiciones  $\vec{r}_i$  se han expresado de la forma

$$f(\vec{r}, t) = \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (2.51)$$

También se pueden describir fuentes superficiales de contaminantes, como incendios forestales, o fuentes lineales como una avenida con la fórmula

$$f(\vec{r}, t) = \begin{cases} Q_i(\vec{r}, t) & \text{si } \vec{r} \in R_i \\ 0 & \text{si } \vec{r} \notin R_i \end{cases} \quad (2.52)$$

Donde  $R_i$  son intervalos del dominio (superficies o líneas), las fuentes también se pueden expresar con la ecuación 2.51, dividiendo en intervalos mas pequeños a los intervalos  $R_i$ , y discretizando la función de tasa de emisión de la fuente  $Q_i(\vec{r}, t)$  [54] [36]

Las figuras 4.4 (página 57) y 4.5 (página 58) presentan cálculos de concentración de monóxido de carbono en la ciudad de Guadalajara a un tiempo  $t = 180\text{min}$ , las fuentes son avenidas que fueron discretizadas de la forma 2.51, la figura 4.4 muestra la concentración con viento climático en temporada de lluvias, y la figura 4.5 muestra la concentración con viento climático de la estación seca [59][54].

## 2.7. Unicidad y estabilidad de la solución en el sentido clásico

Las condiciones descritas por las ecuaciones 2.40 y 2.39 no sólo tienen un adecuado sentido físico, sino también buenas características matemáticas, ya que hacen del modelo de dispersión de la ecuación 2.36 un problema bien planteado en el sentido de Hadamard[21]; es decir, la solución del problema es única, y estable respecto a pequeñas perturbaciones en las condiciones iniciales y el forzamiento[59].

Supongamos un problema de evolución para definir las características necesarias

para cumplir unicidad y estabilidad, y luego aplicar ésto en el problema 2.36

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + A\phi = f \quad (2.53)$$

$$A : \Phi \subset H \rightarrow H \quad (2.54)$$

$$\phi(0) = \phi_0 \quad (2.55)$$

Donde  $A$  es un operador lineal cuyo dominio es un subespacio lineal  $\Phi$  de un espacio de Hilbert  $H$ , suponemos que el problema tiene una solución suficientemente suave y que  $A$  es positivo semidefinido, es decir que cumple la propiedad

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

Donde  $(\phi, \phi)$  representa el producto interior en el espacio de Hilbert. Tomando el producto interior con  $\phi$  de los términos de la ecuación 2.53.

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial t}, \phi \right) = (f, \phi) - (A\phi, \phi) \quad (2.56)$$

Usando  $(A\phi, \phi) \geq 0$  y la desigualdad de Schwartz  $|(x,y)|^2 \leq (x,x)(y,y) = \|x\|^2\|y\|^2$

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

Por la definición del producto interior  $(x,y) = \int_D xy d\vec{r}$

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

Sustituyendo y dividiendo entre  $\|\phi\|$  se obtiene

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

Integrando respecto al tiempo y usando la condición inicial

$$\|\phi\| \leq \int_0^t \|f\| d\tau + \|\phi_0\|$$

Suponiendo que la norma de  $f$  es acotada en el intervalo  $(0, T)$  se obtiene la desigualdad

$$\|\phi\| \leq T \max_{0 \leq t \leq T} \|f(\vec{r}, t)\| + \|\phi_0\| \quad (2.57)$$

Entonces pequeñas variaciones en la norma de  $f$  y  $\phi_0$  inducen pequeñas variaciones en la norma de  $\phi$ , por lo tanto la solución es estable. Si se consideran dos soluciones  $\phi_1$  y  $\phi_2$ , su resta  $\varphi = \phi_1 - \phi_2$  cumple el problema descrito en la ecuación 2.53 con  $f = \phi_0 = 0$ , y de acuerdo a la ecuación 2.57  $\|\varphi\| = 0$ , entonces la solución es única.

La condición de que el operador  $A$  sea positivamente semidefinido es necesaria para la estabilidad de la solución, pues si no se cumple, el operador tiene al menos un valor

propio negativo y la función propia asociada a éste valor propio hace que la norma de la solución crezca con el tiempo[59].

Con este resultado, si el operador que define el problema 2.36 es positivo semidefinido entonces se garantiza la unicidad y estabilidad de la solución.

Si escribimos el problema 2.36 de la forma descrita en la ecuación 2.53

$$A\phi = \vec{U} \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi \quad (2.58)$$

Definida en:

$$\Phi = \left\{ \phi \in C^2(\bar{D}), \quad \mu \frac{\partial \phi}{\partial n} - U_n \phi = 0 \quad \text{en } S^-, \mu \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad \text{en } S^+ \right\} \subset L_2(\bar{D}) \quad (2.59)$$

Donde  $\bar{D} = D \cup S$  es el dominio con su cerradura, y  $L_2(\bar{D})$  es el conjunto de funciones de cuadrado integrable, entonces calculando  $(A\phi, \phi)$

$$(A\phi, \phi) = \int_D \phi \vec{U} \cdot \nabla \phi d\vec{r} + \int_D \sigma \phi^2 d\vec{r} - \int_D \phi \nabla \cdot \mu \nabla \phi d\vec{r} \quad (2.60)$$

Para el primer término del lado derecho usamos las propiedades descritas en las ecuaciones 2.44 y 2.42,

$$\int_D \phi \vec{U} \cdot \nabla \phi d\vec{r} = \int_D \phi \nabla \cdot (\vec{U} \phi) - \phi^2 \nabla \cdot \vec{U} d\vec{r} = \int_D \phi \nabla \cdot (\vec{U} \phi) d\vec{r}$$

Aplicando la propiedad  $\nabla \cdot (f\vec{A}) = \vec{A} \cdot \nabla f + f \nabla \cdot \vec{A}$

$$\int_D \phi \nabla \cdot (\vec{U} \phi) d\vec{r} = \int_D \nabla \cdot (\phi^2 \vec{U}) d\vec{r} - \int_D \phi \vec{U} \cdot \nabla \phi d\vec{r}$$

$$\int_D \phi \vec{U} \cdot \nabla \phi d\vec{r} = \frac{1}{2} \int_D \nabla \cdot (\phi^2 \vec{U}) d\vec{r}$$

Usando el teorema de la divergencia

$$\frac{1}{2} \int_D \nabla \cdot (\phi^2 \vec{U}) d\vec{r} = \frac{1}{2} \int_S \phi^2 \vec{U} \cdot \vec{n} dS = \frac{1}{2} \left[ \int_{S^+} \phi^2 U_n dS + \int_{S^-} \phi^2 U_n dS \right] \quad (2.61)$$

Y para el tercer término del lado derecho de 2.60 usamos 2.44 y el teorema de la divergencia

$$- \int_D \phi \nabla \cdot \mu \nabla \phi d\vec{r} = \int_D \mu |\nabla \phi|^2 d\vec{r} - \int_S \phi \mu \nabla \phi \cdot \vec{n} dS \quad (2.62)$$

Separando la última integral en  $S^+$  y  $S^-$  y se aplican 2.39 y 2.40 obtenemos

$$- \int_D \phi \nabla \cdot \mu \nabla \phi d\vec{r} = \int_D \mu |\nabla \phi|^2 d\vec{r} - \int_{S^-} \phi^2 U_n dS \quad (2.63)$$

Sustituyendo en 2.60 las integrales 2.61 y 2.62 cambiando  $-U_n$  por  $|U_n|$

$$(A\phi, \phi) = \int_D \sigma \phi^2 d\vec{r} + \int_D \mu |\nabla \phi|^2 d\vec{r} + \int_S \phi^2 |U_n| dS \geq 0 \quad (2.64)$$

Debido a que  $\mu \geq 0$  y  $\sigma \geq 0$ , entonces el operador  $A$  es positivo semidefinido. Otra consecuencia de que el operador sea positivo semidefinido es que algunos esquemas de discretización basados en diferencias finitas preservan esta propiedad, y por lo tanto es fácil establecer la existencia, unicidad y estabilidad de la solución del problema discreto. Además es posible usar métodos de separación de operadores por componentes y por lo tanto, trasladar el problema de dos dimensiones a tres problemas simples de una dimensión, lo cual siempre representa una ventaja computacional ya que ahorra memoria y tiempo de cómputo[59].

## Capítulo 3

# El método adjunto

El objetivo principal de la modelación matemática en el problema de protección del medio ambiente es la predicción de las concentraciones de contaminantes nocivos y el desarrollo de métodos que permitan evitar niveles de contaminación peligrosos[59].

El método adjunto utiliza estimaciones duales (la directa y la adjunta) para calcular las concentraciones de un contaminante en zonas ecológicamente importantes. En la meteorología y la oceanología, este método es aplicado por primera vez por Marchuk [30]. Las estimaciones duales se completan una a otra bastante bien en la evaluación y control de la contaminación. Las estimaciones directas utilizan la solución del modelo de transporte de contaminantes y permiten realizar el análisis exhaustivo de la situación ecológica en toda la zona. A diferencia de estimaciones directas, las estimaciones adjuntas utilizan las soluciones del modelo adjunto y explícitamente dependen de los parámetros de modelo como el número de las fuentes, sus posiciones y sus tasas de emisión, y además, de la distribución inicial de contaminantes. Mostrando la contribución de cada fuente a la contaminación de una zona, son muy eficaces para el estudio de sensibilidad de un modelo a variaciones en sus parámetros[59].

### 3.1. Espacio de Hilbert, identidad de Lagrange y operador adjunto

Un espacio de Hilbert  $H$  es un conjunto de elementos que cumple las siguientes propiedades[26]

- Es un espacio lineal
- Tiene un producto interior  $(f, g)$   $f, g \in H$  que asigna un escalar para cada par de miembros
- $(f, g) = (g, f)$
- $(\alpha f, g) = \alpha(f, g)$
- $(f_1 + f_2, g) = (f_1, g) + (f_2, g)$

- $(f, f) > 0$ , si  $f \neq 0$

Un operador  $A$  es un objeto que asigna un elemento  $y$  de un espacio  $R'$  a cada elemento  $x$  de un espacio  $R$ , lo que se escribe como [26]  $y = Ax$ . Un funcional es un caso especial que asigna a cada elemento un real  $y \in \mathbf{R}$ . Un operador es lineal cuando cumple

$$A(\alpha x_1 + \beta x_2) = \alpha Ax_1 + \beta Ax_2$$

Y es acotado si cumple

$$\|Ax\| \leq M\|x\|$$

La definición del operador adjunto en un espacio de Hilbert (generalmente un espacio de funciones con ciertas características de integrabilidad y/o diferenciabilidad), tiene como objetivo generalizar la propiedad que poseen las matrices transpuestas respecto del producto interior en el espacio euclidiano real, es decir [59]

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

Donde  $A$  es una matriz real  $n \times n$ ,  $A^t$  es su traspuesta y  $x, y \in \mathbf{R}^n$

Dado un espacio de Hilbert  $H$  y un operador  $L : H \rightarrow H$  definido en un dominio  $\Phi \subset H$ , el operador adjunto de  $L$  es el operador  $L^* : H \rightarrow H$  definido en el dominio  $\Phi^* \subset H$  que satisface la *identidad de Lagrange* [5][26]

$$(L\varphi, g) = (\varphi, L^*g) \quad \forall \varphi \in \Phi \text{ y } \forall g \in \Phi^* \quad (3.1)$$

### 3.1.1. Existencia del operador adjunto

Dado un operador  $L$  definido en  $\Phi \subset H$  siempre es posible construir un operador  $L^*$  definido en  $\Phi^* \subset H$  que cumpla 3.1, si se define al conjunto  $\Phi^*$  como el subconjunto mas grande de  $H$  tal que cumpla con que el funcional  $f(\varphi) = (L\varphi, g)$  sea acotado

$$|(L\varphi, g)| < M_g \|\varphi\| \quad \forall \varphi \in \Phi, \forall g \in \Phi^*$$

Aplicando éste criterio a una combinación lineal de dos elementos  $g_1, g_2 \in \Phi^*$

$$\frac{|(L\varphi, ag_1 + bg_2)|}{\|\varphi\|} \leq \frac{|a|(L\varphi, g_1)| + |b|(L\varphi, g_2)|}{\|\varphi\|} \leq |a|M_{g_1} + |b|M_{g_2} \quad (3.2)$$

Entonces la combinación lineal pertenece a  $\Phi^*$ , y por su definición  $0 \in \Phi^*$ , entonces  $\Phi^*$  es un subespacio lineal de  $H$  [59] El teorema de Riesz [39] asegura que para un funcional lineal  $T$  existe un único elemento  $v \in H$  tal que  $T(x) = (x, v) \quad \forall x \in H$ , usando éste teorema obtenemos

$$f(\varphi) = (L\varphi, g) = (\varphi, v)$$

Entonces se define al operador  $L^* : \Phi^* \rightarrow H$  como  $L^*g = v$ , sustituyendo en la ecuación anterior obtenemos que cumple con la identidad 3.1.

$$(L\varphi, g) = (\varphi, v) = (\varphi, L^*g)$$

### 3.1.2. Unicidad del operador adjunto

El operador adjunto según la definición dada no es único, pues restringiendo el operador  $L^*$  definido en el dominio  $\Phi^*$  a un subconjunto propio de  $\Phi^*$ , se sigue cumpliendo la identidad 3.1.

Con el fin de establecer unicidad se supone que  $\Phi$  es un subespacio denso en  $H$  y se considera a  $L^*$  con dominio maximal; es decir,  $\Phi^*$  es el mayor subespacio donde se cumple 3.1. Bajo estas condiciones, si  $F^*$  es un adjunto, entonces su dominio  $Dom_{F^*}$  pertenece a  $\Phi^*$  (de lo contrario  $L^*$  se puede expandir al subespacio  $Dom_{F^*} \cup \Phi^*$  y  $\Phi^*$  no sería maximal), y por lo tanto, para  $g \in Dom_{F^*}$  se tiene que [58][59]

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

es decir,

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

Por otra parte, si  $(\varphi, h) = 0 \quad \forall \varphi \in \Phi$ , entonces  $h = 0$ .

Con este último resultado se concluye que  $F^*g - L^*g = 0$ , es decir,  $F^*$  es sólo una restricción de  $L^*$ ; en este sentido  $L^*$  es único. Es importante destacar que, en general, el operador lineal  $L$  y su adjunto son diferentes. Sólo en algunos casos particulares, como el operador de Laplace con condiciones Dirichlet o Neumann homogéneas, se tiene que  $L^* = L$  ( $\Phi^* = \Phi$ ), en tales casos el operador  $L$  se denomina autoadjunto.

El caso  $L^* \neq L$  para  $\Phi^* = \Phi$  es importante, ya que se transmiten propiedades cuando alguno de los dos operadores satisface una característica, por ejemplo, si  $L$  es definido positivo, entonces también  $L^*$  es definido positivo[59]

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

## 3.2. Modelo adjunto para el transporte de contaminantes

Ahora consideremos el modelo 2.36

$$L\phi = \frac{\partial}{\partial t}\phi + \vec{U}(\vec{r}, t) \cdot \nabla\phi + \sigma(\vec{r}, t)\phi - \nabla \cdot \mu(\vec{r}, t)\nabla\phi = f(\vec{r}, t) \quad (3.3)$$

$$\vec{r} \in D \subset \mathbb{R}^2 \quad t \in [0, T] \quad (3.4)$$

$$\phi \in H \subset L_2(\bar{D} \times [0, T]) \quad (3.5)$$

Donde  $L_2(\bar{D} \times [0, T])$  representa el espacio de funciones de cuadrado integrable en  $\bar{D} \times [0, T]$  con dos derivadas continuas en  $x$  y  $y$ , además de una derivada continua en  $t$ ,  $H$  es el subespacio de estas funciones que satisfacen  $\phi(\vec{r}, 0) = 0$  y las ecuaciones 2.39 y 2.40

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial n} - U_n \phi = 0 \quad \text{en } S^-$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad \text{en } S^+$$

Las regiones  $S^+$  y  $S^-$  se definen como la frontera donde el viento sale del dominio y la frontera donde el viento entra al dominio, como se muestra en la figura 2.6 de la página 26

### 3.2.1. Modelo con coeficientes constantes

En el caso con  $\vec{U}, \mu, \sigma$  constantes se puede cambiar el problema al equivalente descrito en la ecuación 2.43

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \mu \nabla^2 \varphi &= h(\vec{r}, t) \\ h(\vec{r}, t) &= e^{[-\frac{U_x}{2\mu}x - \frac{U_y}{2\mu}y + (\sigma + \frac{U_x^2 + U_y^2}{4\mu})t]} \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \\ \mu \frac{\partial \varphi}{\partial n} - \frac{U_n}{2} \varphi &= 0 \quad \text{en } S^- \\ \mu \frac{\partial \varphi}{\partial n} + \frac{U_n}{2} \varphi &= 0 \quad \text{en } S^+ \\ \varphi(\vec{r}, 0) &= e^{[-\frac{U_x}{2\mu}x - \frac{U_y}{2\mu}y]} \phi_0 \\ \vec{r} \in D \subset \mathbb{R}^2, \quad t &\in [0, T] \end{aligned} \quad (3.6)$$

Definimos el operador

$$L = \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \mu \nabla^2 \varphi$$

El cual no es autoadjunto [20], por lo que se define a su operador adjunto  $L^*$

$$L^* = -\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \mu \nabla^2 \varphi$$

Es llamado operador adjunto ya que tiene la propiedad de que al utilizarse en la fórmula de Green junto con el par de funciones  $u, v \in C^2(\bar{D} \times [0, T])$

$$\int_0^T \int_D u L^*(v) - v L(u) d\vec{r} dt = \int_0^t \int_D -u \frac{\partial v}{\partial t} - v \frac{\partial u}{\partial t} + v \mu \nabla^2 u - u \mu \nabla^2 v d\vec{r} dt \quad (3.7)$$

Utilizamos las siguientes identidades consecuencia de la regla del producto de la derivada

$$\frac{\partial(uv)}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot (v \nabla u - u \nabla v) = \nabla v \cdot \nabla u + v \nabla^2 u - \nabla u \cdot \nabla v - u \nabla^2 v = v \nabla^2 u - u \nabla^2 v$$

Sustituyendo en la ecuación 3.7 e integrando el primer término respecto al tiempo, y usando el teorema de la divergencia en el segundo

$$\int_0^T \int_D u L^*(v) - v L(u) d\vec{r} dt = - \int_D uv d\vec{r} \Big|_{t=0}^T + \mu \int_0^T \int_S v \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial v}{\partial n} dS dt \quad (3.8)$$

Ahora introducimos la función  $G$ , llamada función de Green para el operador  $L$ , tal que cumple con

$$L(G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0)) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \delta(t - t_0)$$

$$G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) = 0 \quad \text{para } t < t_0 \quad (\text{principio de causalidad})$$

Tal que

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - \nabla^2 \right) G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \delta(t - t_0)$$

Usando el cambio de variable  $\tau = -t$

$$\left( -\frac{\partial}{\partial \tau} - \nabla^2 \right) G(\vec{r}, -\tau; \vec{r}_0, -\tau_0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \delta(-\tau + \tau_0) = \left( -\frac{\partial}{\partial \tau} - \nabla^2 \right) G(\vec{r}, \tau_0; \vec{r}_0, \tau)$$

$$G(\vec{r}, \tau_0; \vec{r}_0, \tau) = 0 \quad \text{para } \tau > \tau_0 \quad (\text{principio de causalidad})$$

Usando la definición del operador  $L^* = \left( -\frac{\partial}{\partial \tau} - \nabla^2 \right)$

$$L^*(G(\vec{r}, \tau_0; \vec{r}_0, \tau)) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \delta(\tau - \tau_0)$$

Entonces  $G(\vec{r}, t_0; \vec{r}_0, t)$  es la función de Green del operador  $L^*$ , también descrita por  $G^*$

$$G^*(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) = G(\vec{r}, t_0; \vec{r}_0, t)$$

Podemos obtener otra propiedad importante sustituyendo  $v = G^*(\vec{r}, t; \vec{r}_1, t_1) = G(\vec{r}, t_1; \vec{r}_1, t)$  y  $u = G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0)$  en la ecuación 3.8

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_D G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) \delta(\vec{r} - \vec{r}_1) \delta(t - t_1) - G(\vec{r}, t_1; \vec{r}_1, t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \delta(t - t_0) d\vec{r} dt = \\ \mu \int_0^T \int_S G(\vec{r}, t_1; \vec{r}_1, t) \frac{\partial G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0)}{\partial n} - G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) \frac{\partial G(\vec{r}, t_1; \vec{r}_1, t)}{\partial n} dS dt \\ - \int_D G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) G(\vec{r}, t_1; \vec{r}_1, t) d\vec{r} \Big|_{t=0}^T \end{aligned} \quad (3.9)$$

En el tercer término del lado derecho aplicamos principio de causalidad para  $G$  y  $G^*$ , que implica  $G(\vec{r}, 0; \vec{r}_0, t_0) = 0$  y  $G(\vec{r}, t_1; \vec{r}_1, T) = 0$

$$\int_D G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) G(\vec{r}, t_1; \vec{r}_1, t) d\vec{r} \Big|_{t=0}^T = 0 \quad (3.10)$$

Dado que las condiciones de frontera descritas en las ecuaciones 3.6 dependen solamente de las coordenadas espaciales, también se cumplen en las soluciones  $G^*$ , por lo que se pueden sustituir en el primer y segundo término del lado derecho de la ecuación

3.9

$$\begin{aligned}
\int_0^T \int_S G(\vec{r}, t_1; \vec{r}_1, t) \frac{\partial G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0)}{\partial n} dS dt &= \int_0^T \int_{S^+} G(\vec{r}, t_1; \vec{r}_1, t) \left( -\frac{U_n}{2\mu} \right) G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) dS dt \\
&+ \int_0^T \int_{S^-} G(\vec{r}, t_1; \vec{r}_1, t) \left( \frac{U_n}{2\mu} \right) G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) dS dt \\
\int_0^T \int_S G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) \frac{\partial G(\vec{r}, t_1; \vec{r}_1, t)}{\partial n} dS dt &= \int_0^T \int_{S^+} G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) \left( -\frac{U_n}{2\mu} \right) G(\vec{r}, t_1; \vec{r}_1, t) dS dt \\
&+ \int_0^T \int_{S^-} G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) \left( \frac{U_n}{2\mu} \right) G(\vec{r}, t_1; \vec{r}_1, t) dS dt
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Sustituyendo las ecuaciones 3.9 y 3.11 en la ecuación 3.10, y utilizando las propiedades de integración del producto de una función por  $\delta$  se obtiene

$$G(\vec{r}_1, t_1; \vec{r}_0, t_0) = G(\vec{r}_0, t_1; \vec{r}_1, t_0) \tag{3.12}$$

Estas propiedades se pueden utilizar para encontrar la solución  $u$  al problema descrito por  $L$  al sustituir  $v = G^*$  y  $Lu = h(\vec{r}, t)$  en la ecuación 3.8

$$\begin{aligned}
\int_0^T \int_D u \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \delta(t - t_0) - G(\vec{r}, t_0; \vec{r}_0, t) h(\vec{r}, t) d\vec{r} dt = \\
- \int_D u G(\vec{r}, t_0; \vec{r}_0, t) d\vec{r} \Big|_{t=0}^T + \mu \int_0^T \int_S G(\vec{r}, t_0; \vec{r}_0, t) \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial G(\vec{r}, t_0; \vec{r}_0, t)}{\partial n} dS dt
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Usando las propiedades de integración del producto de funciones por  $\delta$  en el primer término del lado izquierdo, y  $G(\vec{r}, t_0; \vec{r}_0, t) = 0$  para  $t > t_0$  en el primer término del lado derecho

$$\begin{aligned}
u(\vec{r}_0, t_0) = \\
\int_0^T \int_D G(\vec{r}, t_0; \vec{r}_0, t) h(\vec{r}, t) d\vec{r} dt + \int_D u(\vec{r}, 0) G(\vec{r}, t_0; \vec{r}_0, 0) d\vec{r} \\
+ \mu \int_0^T \int_S G(\vec{r}, t_0; \vec{r}_0, t) \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial G(\vec{r}, t_0; \vec{r}_0, t)}{\partial n} dS dt
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Intercambiando los símbolos  $\vec{r}$  con  $\vec{r}_0$  y  $t$  con  $t_0$  y usando la propiedad descrita en la ecuación 3.12

$$\begin{aligned}
u(\vec{r}, t) = \\
\int_0^T \int_D G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) h(\vec{r}_0, t_0) d\vec{r}_0 dt_0 + \int_D u(\vec{r}_0, 0) G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, 0) d\vec{r}_0 \\
+ \mu \int_0^T \int_S G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0) \frac{\partial u(\vec{r}_0, t_0)}{\partial n_0} - u(\vec{r}_0, t_0) \frac{\partial G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, t_0)}{\partial n_0} dS_0 dt_0
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Donde  $\frac{\partial}{\partial n_0}$  y  $dS_0$  representan la derivada direccional y el elemento de área respecto a las variables  $\vec{r}_0$ .

De forma que encontrando la función de Green para un problema con sus valores iniciales y de frontera, se pueden calcular las integrales descritas en la ecuación 3.15 y encontrar la solución.

### 3.2.2. Modelo con coeficientes variables

El operador adjunto  $L^*$  se construye de la identidad de Lagrange 3.1

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

Con el producto interior en  $H$  definido como

$$(\phi, \psi) = \int_0^T \int_D \phi \psi d\vec{r} dt$$

De donde

$$(L\phi, g) = \int_0^T \int_D g \frac{\partial \phi}{\partial t} d\vec{r} dt + \int_0^T \int_D g \vec{U} \cdot \nabla \phi d\vec{r} dt + \int_0^T \int_D g \sigma \phi d\vec{r} dt - \int_0^T \int_D g \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) d\vec{r} dt \quad (3.16)$$

Si integramos el primer término del lado derecho con respecto al tiempo, y definimos la siguiente propiedad de  $g$

$$g(\vec{r}, T) = 0 \quad (3.17)$$

Se obtiene integrando por partes

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

Si se usa 2.44 para integrar el segundo término del lado derecho de 3.16 sobre  $D$  y se usa el teorema de la divergencia seguido de aplicar las condiciones 2.39, 2.40 y 2.42

$$\int_0^T \int_D g \vec{U} \cdot \nabla \phi d\vec{r} dt = \int_0^T \int_{S^+} g \phi U_n dS dt + \int_0^T \int_{S^-} g \phi U_n dS dt - \int_0^T \int_D \phi \vec{U} \cdot \nabla g d\vec{r} dt \quad (3.18)$$

Usando la propiedad 2.44 obtenemos las dos igualdades

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_D g \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) d\vec{r} dt &= \int_0^T \int_D \nabla \cdot (g \mu \nabla \phi) d\vec{r} dt - \int_0^T \int_D \mu \nabla g \cdot \nabla \phi d\vec{r} dt \\ \int_0^T \int_D \phi \nabla \cdot (\mu \nabla g) d\vec{r} dt &= \int_0^T \int_D \nabla \cdot (\phi \mu \nabla g) d\vec{r} dt - \int_0^T \int_D \mu \nabla g \cdot \nabla \phi d\vec{r} dt \end{aligned}$$

Relacionando éstas igualdades por el último término y usando el teorema de la divergencia seguido de aplicar las condiciones 2.39 y 2.40 obtenemos la integral sobre  $D$  del último término de la ecuación 3.16

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_D g \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) d\vec{r} dt &= \int_0^T \int_{S^-} g U_n \phi dS dt - \int_0^T \int_{S^+} \mu \phi \frac{\partial g}{\partial n} dS dt \\ &\quad - \int_0^T \int_{S^-} \mu \phi \frac{\partial g}{\partial n} dS dt + \int_0^T \int_D \phi \nabla \cdot (\mu \nabla g) d\vec{r} dt \quad (3.19) \end{aligned}$$

Si definimos las condiciones para  $g$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial n} = 0 \text{ en } S^- \quad (3.20)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial n} + U_n g = 0 \text{ en } S^+ \quad (3.21)$$

$$(3.22)$$

Se obtiene [57]

$$(L\phi, g) = \int_0^T \int_D \phi \left[ -\frac{\partial g}{\partial t} - \vec{U} \cdot \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot (\mu \nabla g) \right] d\vec{r} dt \quad (3.23)$$

Si definimos

$$L^*g = -\frac{\partial g}{\partial t} - \vec{U} \cdot \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot (\mu \nabla g) \quad (3.24)$$

En el dominio  $\Phi^*$  de funciones  $g \in C^2(\bar{D}) \cap C^1([0, T])$  inmediatamente se cumple 3.1

El modelo adjunto en la región  $D$  e intervalo de tiempo  $[0, T]$  se establece igualando  $L^*g$  con un forzamiento  $p(\vec{r}, t)$  el cual se debe definir [31][32][29]

$$-\frac{\partial g}{\partial t} - \vec{U} \cdot \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot (\mu \nabla g) = p(\vec{r}, t) \text{ en } D \times [0, T] \quad (3.25)$$

$$g(\vec{r}, T) = 0 \text{ en } D \quad (3.26)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial n} = 0 \text{ en } S^- \quad (3.27)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial n} + U_n g = 0 \text{ en } S^+ \quad (3.28)$$

Comparamos ahora el problema original de las ecuaciones 2.36-2.40 con el problema adjunto de las ecuaciones 3.25-3.28 en el caso cuando  $f(\vec{r}, t) \equiv 0$  y  $p(\vec{r}, t) \equiv 0$ .

Notemos que después de la sustitución  $t' = T - t$  en la ecuación 3.25, el problema adjunto se diferencia del problema original 2.36-2.40 sólo en el signo de la velocidad del viento  $\vec{U}$ . Así, la parte de salida  $S^+$  (o la parte de entrada  $S^-$ ) para la ecuación 2.36 es, en el mismo tiempo, la parte de entrada  $S^-$  (la parte de salida  $S^+$ ) para la ecuación 3.25. Esto explica el reemplazo de las condiciones de contorno 2.39 y 2.40 del problema directo descrito en las ecuaciones 2.36-2.40 con las condiciones 3.27 y 3.28 para el problema adjunto descrito por las ecuaciones 3.25-3.28.

Además, se deduce de aquí que el problema adjunto está bien planteado en el sentido de Hadamard sólo si se resuelve en la dirección de tiempo opuesta: de  $t = T$  a  $t = 0$ . Más aún, con los cambios  $t' = T - t$  y  $\vec{U}' = -\vec{U}$ , el modelo adjunto 3.25-3.28 adoptará la misma forma que el modelo de transporte 2.36-2.40. Por lo tanto, se puede probar la existencia, la unicidad y la estabilidad de la solución del modelo adjunto de la misma forma que se hizo en la subsección 2.7 de la página 29.

### 3.3. Principio de dualidad y particularidades de las estimaciones duales

Sea  $\Omega \subset D$  una zona ecológicamente sensible en el dominio  $D$ , y sea  $(T - \tau, T)$  un intervalo de tiempo de longitud  $\tau$ . Si  $\omega(\vec{r}, t)$  es una función positiva en el dominio  $\Omega \times (T - \tau, T)$ , tal que

$$\int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \omega(\vec{r}, t) d\vec{r} dt = 1$$

Entonces la integral

$$J(\phi) = \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \omega(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}, t) d\vec{r} dt$$

Representa la concentración promedio del contaminante  $\phi(\vec{r}, t)$  en la zona  $\Omega$  y el intervalo  $(T - \tau, T)$  [57]. Si multiplicamos la ecuación 2.36 por  $g(\vec{r}, t)$  e integramos en  $D \times [0, T]$ .

$$\int_0^T \int_D g \frac{\partial}{\partial t} \phi + g \vec{U}(\vec{r}, t) \cdot \nabla \phi + g \sigma \phi - g \nabla \cdot \mu \nabla \phi d\vec{r} dt = \int_0^T \int_D g f(\vec{r}, t) d\vec{r} dt$$

Usando la definición descrita en la ecuación 2.37 y evaluando la integral sobre  $D$

$$\int_0^T \int_D g \frac{\partial}{\partial t} \phi + g \vec{U}(\vec{r}, t) \cdot \nabla \phi + g \sigma \phi - g \nabla \cdot \mu \nabla \phi d\vec{r} dt = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\vec{r}_i, t) Q_i(t) dt \quad (3.29)$$

Empezando en el segundo término de la ecuación 2.36 usando 2.44

$$\int_0^T \int_D g \vec{U} \cdot \nabla \phi d\vec{r} dt = \int_0^T \int_D \nabla \cdot (\phi g \vec{U}) d\vec{r} dt - \int_0^T \int_D \phi \nabla \cdot (g \vec{U}) d\vec{r} dt$$

Usando de nuevo las ecuaciones 2.44 y 2.42 en el segundo término del lado derecho de la ecuación anterior

$$\int_0^T \int_D \phi \nabla \cdot (g \vec{U}) d\vec{r} dt = \int_0^T \int_D \phi g \nabla \cdot \vec{U} + \phi \nabla g \cdot \vec{U} d\vec{r} dt = \int_0^T \int_D \phi \nabla g \cdot \vec{U} d\vec{r} dt$$

Entonces obtenemos

$$\int_0^T \int_D g \vec{U} \cdot \nabla \phi d\vec{r} dt = \int_0^T \int_D \nabla \cdot (\phi g \vec{U}) d\vec{r} dt - \int_0^T \int_D \phi \nabla g \cdot \vec{U} d\vec{r} dt$$

Aplicando el teorema de la divergencia

$$\int_0^T \int_D g \vec{U} \cdot \nabla \phi d\vec{r} dt = \int_0^T \int_S \phi g U_n dS dt - \int_0^T \int_D \phi \nabla g \cdot \vec{U} d\vec{r} dt \quad (3.30)$$

Ahora en el cuarto término de la ecuación 2.36 usando la propiedad mostrada en la ecuación 2.44

$$\int_0^T \int_D g \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) d\vec{r} dt = \int_0^T \int_D \nabla \cdot (g \mu \nabla \phi) d\vec{r} dt - \int_0^T \int_D \mu \nabla g \cdot \nabla \phi d\vec{r} dt$$

Volviendo a usar la propiedad de 2.44 en el segundo término de la ecuación anterior

$$\int_0^T \int_D \mu \nabla g \cdot \nabla \phi d\vec{r} dt = \int_0^T \int_D \nabla \cdot (\phi \mu \nabla g) d\vec{r} dt - \int_0^T \int_D \phi \nabla \cdot (\mu \nabla g) d\vec{r} dt$$

Sustituyendo en la ecuación previa

$$\int_0^T \int_D g \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) d\vec{r} dt = \int_0^T \int_D \nabla \cdot (g \mu \nabla \phi) d\vec{r} dt - \int_0^T \int_D \nabla \cdot (\phi \mu \nabla g) d\vec{r} dt + \int_0^T \int_D \phi \nabla \cdot (\mu \nabla g) d\vec{r} dt$$

Usando el teorema de la divergencia y las condiciones de frontera, descritos por las ecuaciones 2.40, 2.39, 3.27 y 3.28

$$\int_0^T \int_D g \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) d\vec{r} dt = \int_0^T \int_{S^-} g U_n \phi dS dt + \int_0^T \int_{S^+} \phi U_n g dS dt + \int_0^T \int_D \phi \nabla \cdot (\mu \nabla g) d\vec{r} dt$$

$$\int_0^T \int_D g \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) d\vec{r} dt = \int_0^T \int_S \phi g U_n dS dt + \int_0^T \int_D \phi \nabla \cdot (\mu \nabla g) d\vec{r} dt \quad (3.31)$$

Sustituyendo en la ecuación 3.29 usando las ecuaciones 3.30 y 3.31

$$\int_0^T \int_D g \frac{\partial \phi}{\partial t} - \phi \nabla g \cdot \vec{U} + g \sigma \phi - \phi \nabla \cdot (\mu \nabla g) d\vec{r} dt = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\vec{r}_i, t) Q_i(t) dt \quad (3.32)$$

Ahora calculando la integral sobre  $D \times [0, T]$  del modelo adjunto 3.25 multiplicado por  $\phi$

$$\int_0^T \int_D -\phi \frac{\partial g}{\partial t} - \phi \mathbf{U} \cdot \nabla g + \phi \sigma g - \phi \nabla \cdot (\mu \nabla g) d\mathbf{r} dt = \int_0^T \int_D \phi p(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt \quad (3.33)$$

Restando la ecuación 3.33 de la ecuación 3.32

$$\int_0^T \int_D g \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial g}{\partial t} d\vec{r} dt = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\vec{r}_i, t) Q_i(t) dt - \int_0^T \int_D \phi p(\vec{r}, t) d\vec{r} dt \quad (3.34)$$

Usando la regla de Leibnitz en el lado izquierdo de la ecuación e integrando

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

Aplicando las condiciones iniciales de la ecuación 3.26 y sustituyendo en la ecuación 3.34

$$\int_0^T \int_D \phi(\vec{r}, t) p(\vec{r}, t) d\vec{r} dt = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\vec{r}_i, t) Q_i(t) dt + \int_D g(\vec{r}, 0) \phi(\vec{r}, 0) d\vec{r} \quad (3.35)$$

Si el forzamiento del problema adjunto  $p(\vec{r}, t)$  se define como [54]

$$p(\vec{r}, t) = \begin{cases} \omega(\vec{r}, t), & \text{si } (\vec{r}, t) \in \Omega \times (T - \tau, T) \\ 0, & \text{En caso contrario} \end{cases} \quad (3.36)$$

Entonces la fórmula 3.35 conduce a una estimación de la concentración promedio del contaminante  $\phi(\vec{r}, t)$  en la zona  $\Omega$  e intervalo de tiempo  $(T - \tau, T)$  [54]

$$J(\phi) = \int_{T-\tau}^T \int_D \omega(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}, t) d\vec{r} dt = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\vec{r}_i, t) Q_i(t) dt + \int_D g(\vec{r}, 0) \phi_0(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.37)$$

En el caso particular cuando  $\omega(\vec{r}, t) = 1/(\tau|\Omega|)$ , donde  $|\Omega|$  es el área de  $\Omega$ , obtenemos las estimaciones equivalentes o duales [31][54], la estimación directa es

$$J(\phi) = \int_{T-\tau}^T \int_D \frac{1}{\tau|\Omega|} \phi(\vec{r}, t) d\vec{r} dt \quad (3.38)$$

Y la estimación adjunta

$$J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\vec{r}_i, t) Q_i(t) dt + \int_D g(\vec{r}, 0) \phi_0(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.39)$$

La concentración promedio del contaminante se puede estimar con la condición inicial  $\phi_0$ , las tasas de emisión de las fuentes  $Q_i(t)$  y la solución del modelo adjunto  $g(\vec{r}, t)$ . Notemos que la estimación adjunta 3.39 sólo usa los valores  $g(\vec{r}_i, t)$  y  $g(\vec{r}, 0)$ , es decir que depende de la solución adjunta en los nodos  $\vec{r}_i$  y la solución adjunta en el momento  $t = 0$  respectivamente [54]

El hecho de que el problema adjunto de las ecuaciones 3.25 - 3.28 puede resolverse para cada zona de importancia ecológica como se muestra en la figura 3.1, donde la zona sensible se representa por el rectángulo ubicado en el parque Colomos de Guadalupe, y las curvas de nivel representan el valor de  $g$  en 2 momentos, las líneas sólidas representan  $t = 180min$  y las líneas punteadas representan  $t = 210min$ . Estas curvas de nivel son independientes del número de plantas industriales, las tasas de emisión y sus posiciones. Los valores de  $g(\vec{r}, t)$  representan la influencia de una fuente en el punto  $\vec{r}$  al tiempo  $t$  sobre la concentración promedio en la región de interés, lo que las hace eficientes en el estudio de sensibilidad de la solución, por ejemplo, cuando se analizan la N-dependencia, la  $r_i$ -dependencia y/o la  $Q_i$ -dependencia de la concentración en la zona [54].

Mientras las estimaciones directas requieren la solución del problema de transporte de contaminantes 2.36-2.40 y permiten realizar un análisis exhaustivo de la situación ecológica en toda la zona, las estimaciones adjuntas usan sólo soluciones al problema adjunto y son eficaces y económicos en el estudio de sensibilidad problema [31]. A veces la estimación 3.39 proporciona una respuesta inmediata a un problema no trivial [54].

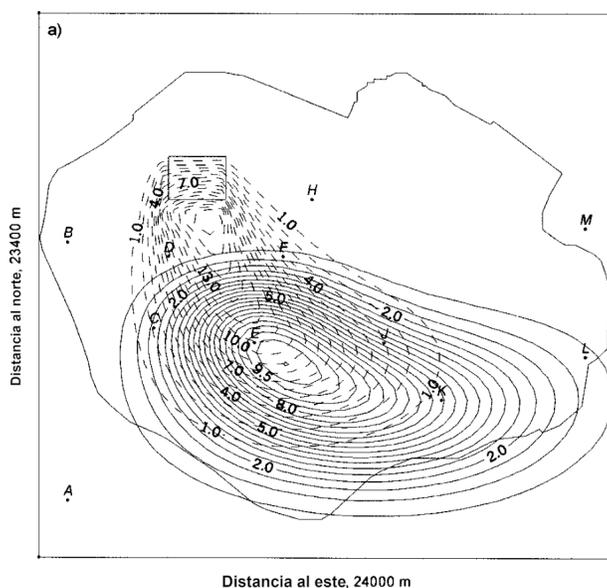


Figura 3.1: Isolneas de la solución del problema adjunto  $g(\vec{r}, t)$  calculada para el parque Colomos en la ciudad de Guadalajara en  $t = T - 60min$  (líneas punteadas) y  $t = T - 90min$  (líneas continuas);  $T = 270min$ . Los valores de  $g(\vec{r}, t)$  representan la influencia de una fuente en el punto  $\vec{r}$  al tiempo  $t$  sobre la concentración promedio en la región de interés definida por un rectángulo en el parque Colomos[53], esta solución fue calculada para un viento climático de temporada húmeda, con una velocidad de  $3.5 \frac{m}{s}$  y dirección del sureste hacia oeste. El coeficiente de difusión utilizado fue  $\mu = 600 \frac{m^2}{s}$ , la difusión causa la extensión del área mostrado por las curvas de nivel. Es importante recordar que la solución del problema adjunto se obtiene con una inversión del tiempo  $t' = -t$  y de la velocidad del viento  $\vec{U}' = -\vec{U}$ , esto explica que la difusión actúe de tiempos posteriores hacia los tiempos iniciales (primero las líneas continuas y luego las líneas punteadas)

### 3.4. Sensibilidad de las estimaciones

Definiendo la variación de un funcional  $J$  con dominio  $\Phi$  como[41]

$$\delta J(\phi) = \left. \frac{d}{d\tau} J(\phi + \tau \delta\phi) \right|_{\tau=0} \quad \tau \in \mathbf{R}, \quad \phi, \phi' \in \Phi \quad (3.40)$$

Aplicandolo a la ecuación 3.38, sea  $\phi$  una solución del problema 2.36 con condiciones iniciales  $\phi_0$  y  $N$  fuentes de contaminantes con intensidades  $Q_i$ . La función  $\phi'$  también corresponde a una solución del problema 2.36, pero con condiciones iniciales  $\phi'_0$  y  $N$

fuentes de contaminantes con intensidades  $Q'_i$

$$\delta J(\phi) = \frac{d}{d\tau} \left[ \int_0^T \int_D \frac{1}{T|\Omega|} (\phi + \tau\phi') d\vec{r} dt \right] \Big|_{\tau=0} = \int_0^T \int_D \frac{1}{T|\Omega|} \phi' d\vec{r} dt = J(\phi') \quad (3.41)$$

Usamos la ecuación 3.37 para describir al funcional  $J(\phi')$  mediante su dependencia con las intensidades de las fuentes de contaminantes  $Q'_i$  y condiciones iniciales  $\phi'_0$

$$\delta J(\phi) = \int_0^T \int_D \frac{1}{T|\Omega|} \phi'(\vec{r}, t) d\vec{r} dt = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\vec{r}_i, t) Q'_i(t) dt + \int_D g(\vec{r}, 0) \phi'_0(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.42)$$

Donde  $g(\vec{r}, t)$  es la solución al problema adjunto.  $\delta J(\phi)$  es una variación de la concentración de contaminación en la zona  $\Omega$ , y se muestra que depende únicamente de perturbaciones en la contaminación inicial  $\phi'_0(\vec{r})$ , en las tasas de emisión  $Q'_i(t)$  o en el número de plantas industriales  $N$  [57].

Denotemos ahora por  $\vec{r}_i$  y  $\vec{r}'_i$  los puntos de dos posiciones diferentes de las plantas industriales. Entonces, la  $\vec{r}_i$ -dependencia de la concentración  $J(\phi)$  se puede expresar como

$$\delta J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T [g(\vec{r}'_i, t) - g(\vec{r}_i, t)] Q_i(t) dt \quad (3.43)$$

Las ecuaciones 3.42 y 3.43 son válidas para variaciones arbitrarias.

Vale la pena analizar la sensibilidad de  $J(\phi)$  respecto a errores en la medición de los parámetros  $\mu, \sigma, \vec{U}$  y  $f$  del modelo. Tomemos una solución  $\phi$  del problema 2.36 y una solución  $\tilde{\phi} = \phi + \phi'$  del problema con perturbaciones en los parámetros [57].

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi + \phi') + (\vec{U} + \vec{U}') \cdot \nabla (\phi + \phi') + (\sigma + \sigma') (\phi + \phi') - \nabla \cdot [(\mu + \mu') \nabla (\phi + \phi')] = f + f' \quad (3.44)$$

$$\phi(\vec{r}, 0) + \phi'(\vec{r}, 0) = \phi_0(\vec{r}) + \phi'_0(\vec{r}) \quad (3.45)$$

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} (\phi + \phi') - U_n (\phi + \phi') = 0 \text{ en } S^+ \quad (3.46)$$

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} (\phi + \phi') = 0 \text{ en } S^- \quad (3.47)$$

$$f'(\vec{r}, t) = \sum_{i=1}^N \delta Q_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) + \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(\vec{r} - [\vec{r}_i + \delta \vec{r}_i]) \quad (3.48)$$

$$\vec{r} \in D \subset \mathbb{R}^2, \quad t \in [0, T] \quad (3.49)$$

$$|\mu'| \ll \mu, \quad |\sigma'| \ll \sigma, \quad \|\vec{U}'\| \ll \|\vec{U}\|, \quad |f'| \ll f \quad (3.50)$$

Donde  $S$  representa la frontera del dominio  $D$  y está separada en  $S^+$  y  $S^-$  como se muestra en la figura 2.6 (página 26). Se añade la suposición de que en el problema descrito en las ecuaciones 3.44-3.48,  $\vec{U}'$  y  $\mu$  se reducen a cero en la frontera  $S$ . Si las perturbaciones  $\vec{U}', \phi', \mu', \sigma', \phi'_0, \vec{r}'_i$  son pequeñas respecto a los valores reales, ésto permite descartar las perturbaciones de segundo orden [57].

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial \phi'}{\partial t} \right) + \left( \vec{U} \cdot \nabla \phi + \vec{U}' \cdot \nabla \phi' + \vec{U}'' \cdot \nabla \phi \right) \\ & + (\sigma \phi + \sigma' \phi + \sigma \phi') - (\nabla \cdot \mu' \nabla \phi + \nabla \cdot \mu \nabla \phi' + \nabla \cdot \mu \nabla \phi) = f + f' \end{aligned}$$

Restando la ecuación 2.36 (página 25)

$$\frac{\partial \phi'}{\partial t} + \left( \vec{U} \cdot \nabla \phi' + \vec{U}' \cdot \nabla \phi \right) + (\sigma' \phi + \sigma \phi') - (\nabla \cdot \mu' \nabla \phi + \nabla \cdot \mu \nabla \phi') = f'$$

Ordenando por términos dependientes de  $\phi$  y  $\phi'$  multiplicando por  $g$  e integrando sobre  $D \times [0, t]$

$$\int_0^T \int_D g \frac{\partial \phi'}{\partial t} + g \vec{U} \cdot \nabla \phi' + g \sigma \phi' - g \nabla \cdot \mu \nabla \phi' d\vec{r} dt = \int_0^T \int_D g f' - g \vec{U}' \cdot \nabla \phi - g \sigma' \phi + g \nabla \cdot \mu' \nabla \phi d\vec{r} dt \quad (3.51)$$

Siguiendo el mismo proceso mostrado en las ecuaciones 3.29 a 3.32 del lado izquierdo de la ecuación

$$\int_0^T \int_D g \frac{\partial \phi'}{\partial t} - \phi' \vec{U} \cdot \nabla g' + g \sigma \phi' - \phi' \nabla \cdot \mu \nabla g d\vec{r} dt = \int_0^T \int_D g f' - g \vec{U}' \cdot \nabla \phi - g \sigma' \phi + g \nabla \cdot \mu' \nabla \phi d\vec{r} dt \quad (3.52)$$

Integrando por partes el primer término del lado izquierdo y usando la condición inicial adjunta  $g(\vec{r}, T) = 0$

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_D g \frac{\partial \phi'}{\partial t} d\vec{r} dt &= \int_D g(\vec{r}, T) \phi'(\vec{r}, T) - g(\vec{r}, 0) \phi'(\vec{r}, 0) d\vec{r} - \int_0^T \int_D \phi' \frac{\partial g}{\partial t} d\vec{r} dt \\ &= \int_0^T \int_D -\phi' \frac{\partial g}{\partial t} d\vec{r} dt - \int_D g(\vec{r}, 0) \phi'(\vec{r}, 0) d\vec{r} \end{aligned} \quad (3.53)$$

Sustituyendo en la ecuación 3.52

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_D -\phi' \frac{\partial g}{\partial t} - \phi' \vec{U} \cdot \nabla g' + g \sigma \phi' - \phi' \nabla \cdot \mu \nabla g d\vec{r} dt \\ & = \int_0^T \int_D g f' - g \vec{U}' \cdot \nabla \phi - g \sigma' \phi + g \nabla \cdot \mu' \nabla \phi d\vec{r} dt + \int_D g(\vec{r}, 0) \phi'(\vec{r}, 0) d\vec{r} \end{aligned} \quad (3.54)$$

Aplicamos las ecuaciones 3.33, 3.36 y 3.38 sobre el lado izquierdo de la ecuación

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_D -\phi' \frac{\partial g}{\partial t} - \phi' \nabla g \cdot \vec{U} + g \sigma \phi' - \phi' \nabla \cdot (\mu \nabla g) d\vec{r} dt \\ & = \int_0^T \int_D \phi' p(\vec{r}, t) d\vec{r} dt = J(\phi') \end{aligned} \quad (3.55)$$

Y el primer término del lado derecho de 3.54 se calcula usando la definición 3.48

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_D g f' d\vec{r} dt &= \int_0^T \int_D \sum_{i=1}^N g(\vec{r}, t) Q'_i(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) + \sum_{i=1}^N g(\vec{r}, t) Q_i(t) \delta(\vec{r} - [\vec{r}_i + \vec{r}'_i]) d\vec{r} dt \\ &= \int_0^T \sum_{i=1}^N g(\vec{r}_i, t) Q'_i(t) + \sum_{i=1}^N g(\vec{r}_i + \vec{r}'_i, t) Q_i(t) dt \end{aligned}$$

Sustituyendo la aproximación lineal  $g(\vec{r}_i + \vec{r}_i', t) \approx \nabla g(\vec{r}_i, t) \cdot \vec{r}_i'$

$$\int_0^T \int_D g f' d\vec{r} dt = \int_0^T \sum_{i=1}^N g(\vec{r}_i, t) Q_i'(t) + \sum_{i=1}^N (\nabla g(\vec{r}_i, t) \cdot \vec{r}_i') Q_i(t) dt \quad (3.56)$$

Sustituyendo las ecuaciones 3.55, 3.56 y 3.41 en la ecuación 3.54 obtenemos

$$\begin{aligned} \delta J(\phi) = J(\phi') &= \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\vec{r}_i, t) Q_i'(t) dt + \int_D g(\vec{r}, 0) \phi_0'(\vec{r}) d\vec{r} \\ &+ \sum_{i=1}^N \int_0^T [\nabla g(\vec{r}_i, t) \cdot \vec{r}_i'] Q_i(t) dt - \int_0^T \int_D g \left\{ \vec{U}' \cdot \nabla \phi + \sigma' \phi - \nabla \cdot [\mu' \nabla \phi] \right\} d\vec{r} dt \end{aligned} \quad (3.57)$$

Esta fórmula de sensibilidad muestra la contribución de las pequeñas perturbaciones  $Q_i'(t)$  y  $\vec{U}', \phi', \mu', \sigma', \phi_0', \vec{r}_i'$  a la variación  $\delta J(\phi)$  en la zona  $\Omega$ . Los dos primeros términos en el lado derecho de la ecuación 3.57 coinciden con la ecuación 3.42 y demuestran el papel de las perturbaciones en las tasas de emisión  $Q_i'(t)$  y la contaminación inicial  $\phi_0'$ , el tercer término representa las contribuciones por perturbaciones en la ubicación de las fuentes. El último término representa el efecto de las perturbaciones  $\vec{U}', \mu'$  y  $\sigma'$  y es el único término en 3.57 que utiliza la solución del problema no perturbado en el dominio  $D \times (0, T)$ . Sin embargo, si  $\vec{U}' = \mu' = \sigma' = 0$  en todas partes del dominio  $D$  entonces la solución  $\phi(\vec{r}, t)$  no se utiliza, y el problema adjunto 3.25-3.28 es el único problema a ser resuelto [57][35].

## Capítulo 4

# Aplicaciones del método adjunto en la estimación de la concentración de contaminantes

En este capítulo se muestran aplicaciones del método adjunto para estimar el impacto de concentraciones de contaminantes en una región de interés, como el caso de un derrame petrolero o las emisiones vehiculares. El método adjunto también se puede utilizar para detectar fuentes de contaminantes que sobrepasen una tasa determinada de emisiones, esto se puede utilizar para detectar una fábrica que emite más contaminantes de los permitidos por una norma sanitaria.

También es posible determinar la mejor posición para ubicar una nueva fuente de contaminantes, de tal forma que la concentración promedio no viole las normas sanitarias en una región de importancia.

### 4.1. Derrame de petróleo

El transporte marítimo de petróleo ha aumentado en los últimos años, y también los estudios sobre la difusión de los derrames de petróleo[9][10]. La concentración media de petróleo en las zonas ecológicamente sensibles (zonas de pesca, turísticas, etcétera) se pueden obtener con las estimaciones descritas en las ecuaciones 3.38 y 3.39.

Consideremos un problema de derrame en una dimensión. Sea  $D = [a, b]$  un segmento de recta que representa la trayectoria de un petrolero, y  $x_0$  el punto de un accidente,  $\Omega = [y, y + h]$  es un intervalo que representa una zona ecológicamente importante en  $D$ , el petróleo se propaga con una velocidad constante y positiva  $U$  a lo largo de el eje  $x$ . Con el fin de simplificar el problema e introducir de forma mas sencilla la estimación con el método adjunto, no consideraremos el proceso difusivo ni el de decaimiento ( $\mu = \sigma = 0$ ) en la ecuación 2.8, el problema se reduce a

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + U \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} = Q(t) \delta(x - x_0)$$

Suponiendo que en todo el proceso la concentración de petróleo es cero en los extremos  $\phi(a,t) = \phi(b,t) = 0$  y que la concentración es cero en todos los puntos al momento inicial  $\phi(x,0) = 0$ , la concentración media del petróleo está dada por [47]

$$J(\phi) = \frac{1}{h} \int_y^{y+h} \phi(x,T) dx \quad (4.1)$$

En la zona  $\Omega$  para  $t = T$ , definiendo el producto interior de dos funciones como

$$(\phi, g) = \int_a^b \phi(x)g(x)dx$$

Para definir el operador adjunto  $A^*$  utilizando la identidad de Lagrange  $(A\phi, g) = (\phi, A^*g)$ [48], encontramos que el operador  $A\phi = U\partial\phi/\partial x$  es antisimétrico, es decir que cumple  $A^* = -A$ , por lo tanto  $-A$  es el operador adjunto y  $(A\phi, g) = (\phi, -Ag)$

Siguiendo el enfoque adjunto[47], se considera en el dominio  $[a, b] \times [0, T]$  el problema adjunto

$$-\frac{\partial g}{\partial t} - U \cdot \frac{\partial g}{\partial x} = 0$$

Definiendo las condiciones de frontera  $g(a,t) = g(b,t) = 0$  y la condición inicial adjunta en  $t = T$ .

$$g(x, T) = q(x) = \begin{cases} 1/h, & \text{si } x \in [y, y+h] \\ 0, & \text{de otro modo} \end{cases} \quad (4.2)$$

La solución se puede encontrar mediante el método de curvas características, y es  $g(x,t) = q(x + U(T-t))$ , que representa un escalón que se mueve a velocidad  $U$  en la dirección opuesta al movimiento de la mancha ocasionada por el derrame. Siguiendo el mismo procedimiento que en la ecuación 3.35 con las condiciones descritas en la ecuación 4.2 se obtiene

$$J(\phi) = \int_0^T g(x_0, t)Q(t)dt = \int_0^T q(x_0 + U(T-t))Q(t)dt \quad (4.3)$$

Esta estimación vincula la concentración promedio de contaminante en la región  $\Omega$  con el valor de la solución del problema adjunto en el punto del derrame[48]

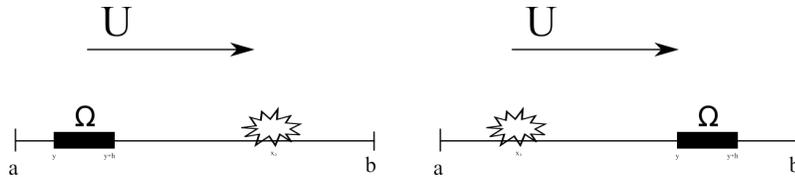


Figura 4.1: Dos casos de el movimiento de la mancha de petróleo, a la izquierda se muestra un caso inofensivo para  $\Omega$  y a la derecha un caso peligroso para  $\Omega$

Hay dos variantes para el comportamiento de la concentración de contaminante en  $\Omega$  dependiendo de la dirección de la corriente y la posición relativa del derrame, en la

figura 4.1 se puede observar que para un caso el derrame es inofensivo para  $\Omega$  dado que la dirección de  $U$  aleja la mancha de petróleo de la zona sensible, mientras que para el otro es peligroso pues la mancha se acerca a  $\Omega$ .

Esto se puede concluir de la ecuación 4.3 dado que en el primer caso  $g(x_0, t) = 0$  para  $t \in [0, T]$ , y por tanto  $J(\phi) = 0$ , que quiere decir que  $\Omega$  no será contaminada, en el segundo caso  $g(x_0, t) = 1/h$  para  $t \in [\tau, \Delta\tau]$  donde  $\tau = (y - x_0)/U$  es el tiempo necesario para que la mancha llegue a la zona, y  $\Delta\tau = h/U$  el intervalo de tiempo que tarda en llegar al otro extremo de la zona sensible. Esto da como resultado la estimación

$$J(\phi) = \frac{1}{h} \int_{\tau}^{\tau_f} Q(t) dt$$

Entonces la solución  $g$  al problema adjunto determina la sensibilidad de la concentración respecto a variaciones en el lugar del accidente  $x_0$  y la tasa de vertido del petróleo  $Q(t)$  [47], de igual forma se puede utilizar para estimar la concentración de un agente biológico para biorremediación [34][35].

## 4.2. Estimación adjunta y respuesta del modelo de derrame de petróleo en dos dimensiones

El derrame de petróleo en dos dimensiones se describe mediante una función de concentración de contaminantes  $\phi$  con dominio acotado  $D \in \mathbb{R}^2$  y su frontera  $S = \partial D$ , para una fuente de petróleo ubicada en el punto  $\vec{r}_0 = (x_0, y_0)$ , utilizando el modelo descrito en las ecuaciones 2.36, 2.37 y 2.42 en la página 25.

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi + U \cdot \nabla \phi + \sigma \phi - \nabla \cdot \mu \nabla \phi = f(\vec{r}, t) \quad (4.4)$$

$$f(\vec{r}, t) = Q(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \quad (4.5)$$

$$\nabla \cdot U = 0 \quad (4.6)$$

$$\phi(\vec{r}, 0) = 0 \quad (4.7)$$

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} \phi - U_n \phi = 0 \text{ en } S^- \quad (4.8)$$

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} \phi = 0 \text{ en } S^+ \quad (4.9)$$

Y como se muestra en el modelo adjunto 3.24 en la página 40.

$$-\frac{\partial}{\partial t} g - U \cdot \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot \mu \nabla g = p(\vec{r}, t) \quad (4.10)$$

$$g(\vec{r}, T) = 0 \quad (4.11)$$

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} g = 0 \text{ en } S^- \quad (4.12)$$

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} g + U_n g = 0 \text{ en } S^+ \quad (4.13)$$

La frontera está descrita por  $S$ , y separada en dos partes,  $S^+$  y  $S^-$  como se describe en la figura 2.6 de la página 26

Haciendo las mismas operaciones que se usaron para obtener 3.35 y aplicando las condiciones de frontera obtenemos [48]

$$\int_0^T \int_D p(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}, t) d\vec{r} dt = \int_0^T g(\vec{r}_0, t) Q(t) dt \quad (4.14)$$

Si definimos  $p$  de la forma

$$p(\vec{r}, t) = \begin{cases} 1/(\tau|\Omega|), & \text{si } (\vec{r}, t) \in \Omega \times (T - \tau, T) \\ 0, & \text{de otro modo} \end{cases} \quad (4.15)$$

El lado izquierdo de 4.14 es equivalente al valor medio de la concentración de contaminante en  $\Omega$  en el intervalo  $(T - \tau, T)$

$$J(\phi) \equiv \frac{1}{\tau|\Omega|} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \phi(\vec{r}, t) d\vec{r} dt \quad (4.16)$$

De tal forma que se podemos calcular  $J(\phi)$  usando el lado derecho de la identidad 4.14

$$J(\phi) = \int_0^T g(\vec{r}_0, t) Q(t) dt \quad (4.17)$$

Debido a que los problemas 4.4 y 4.10 son lineales, tenemos

$$\delta J(\phi) = \int_0^T g(\vec{r}_0, t) \delta Q(t) dt$$

donde  $\delta J(\phi)$  es una variación en la concentración del contaminante y  $\delta Q(t)$  es una variación en la tasa de vertido del petróleo, de tal forma que  $g$  es una función que describe la respuesta en la concentración del contaminante respecto a variaciones en la tasa de vertido de petróleo.

También si suponemos que la tasa de emisión es constante en el tiempo obtenemos de 4.17 [48]

$$J(\phi) = Q \int_0^T g(\vec{r}_0, t) dt$$

La figura 4.2 muestra la solución directa (línea continua) y la solución adjunta (línea punteada), la solución directa depende de la ubicación  $\vec{r}_0$  de la fuente contaminante, mientras la solución adjunta depende solamente de la región de interés, es decir que fijando una posición de la fuente la solución nos da la concentración del contaminante en todo el dominio, mientras que si fijamos la región de interés  $\Omega$ , su solución nos dice la influencia de cada punto  $\vec{r}_0$  en concentración promedio del contaminante de  $\Omega$ , por lo que no hay que volver a resolver el problema para conocer la concentración promedio en  $\Omega$  en caso de un derrame en cada punto  $\vec{r}_i$ .

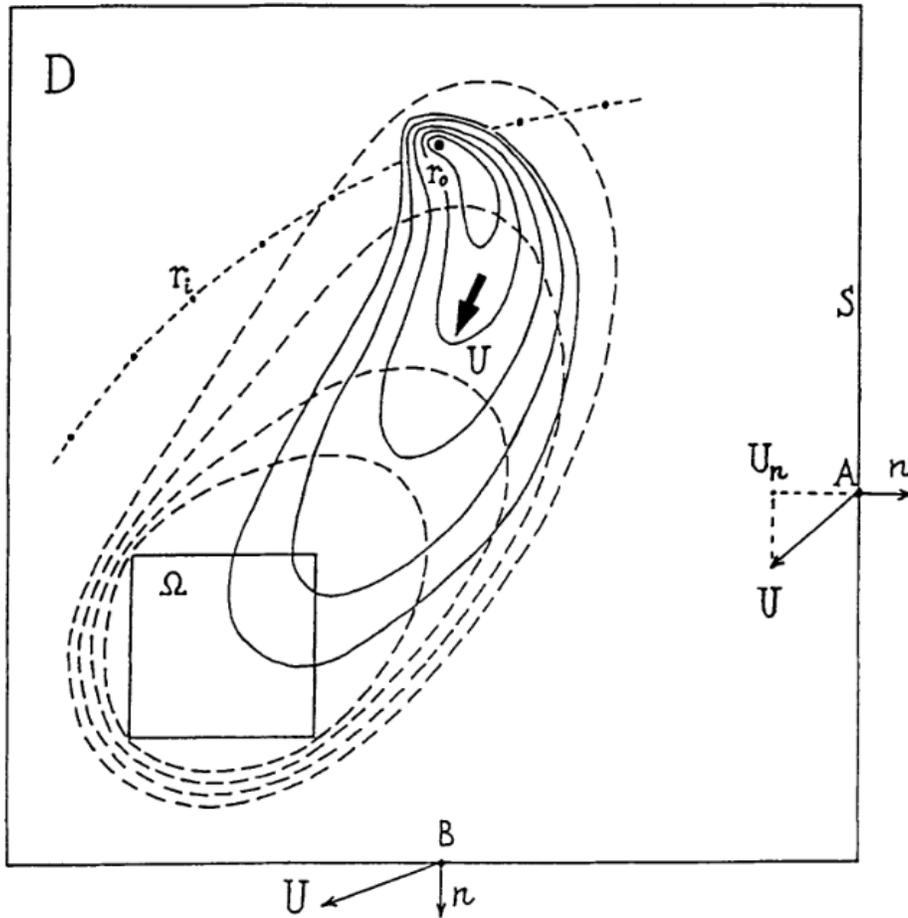


Figura 4.2: Las líneas sólidas representan las isolíneas de la solución al problema  $\phi$ , las líneas punteadas representan las isolíneas de la solución al problema adjunto  $g$ .  $r_0$  es la fuente de contaminante, y  $\Omega$  la región de interés para conocer la concentración de contaminante [48]

. En este ejemplo el viento va de noreste a suroeste, lo que explica que las curvas de nivel se vean “arrastradas” hacia esa dirección, la expansión del área contaminada en todas las direcciones se debe al fenómeno de difusión.

### 4.3. Aplicación de las estimaciones duales

El método directo y el adjunto se complementan entre sí en el estudio de derrames de petróleo, cada método tiene sus propiedades y es importante saber cuál es el idóneo a utilizar dependiendo de la situación. Algunas de éstas situaciones y el método mas conveniente para éstas se analizan en la siguiente subsección.

Así como en la ecuación 4.2 es conveniente resolver el problema 4.4 para conocer

la concentración de contaminantes en todo el dominio, en muchas zonas sensibles, o si se requiere calcular el tiempo disponible para tomar una medida preventiva [48][56].

Si se resuelve 4.10 se tiene la ventaja de que el problema no depende de la tasa de derrame  $Q$ , ni de  $\vec{r}_0$ , y por lo tanto se puede resolver para una zona sensible, y luego hacer una estimación rápidamente para cualquier accidente usando la ecuación 4.17

### 4.3.1. Búsqueda de la parte mas peligrosa en la ruta de un buque tanque

En la situación de un buque tanque con una trayectoria dada, bajo la suposición de  $U, Q$  constantes, buscamos cual es el punto de la ruta mas peligroso, es decir que un derrame en ese punto presenta una concentración mayor de contaminante en la zona de interés  $\Omega$  [56].

Si creamos una malla compuesta por  $K$  puntos que representa la ruta de el buque, para calcular el impacto de un derrame en cada uno de los puntos usando el método directo hay que resolver  $K$  veces el problema 4.4 y la integral 4.16 para luego obtener el máximo valor de  $J(\phi)$  para cada una de estas soluciones.

En el caso de utilizar el método adjunto, solo es necesario resolver una vez el problema de la ecuación 4.10 y calcular  $K$  veces la integral 4.17 para encontrar cual es el punto que presenta un valor menor de  $J(\phi)$ , éste esquema requiere  $K$  veces menos ejecuciones para obtener la evolución del problema, lo cuál se vuelve importante si  $K$  es un número grande, especialmente si el problema es tridimensional [48].

### 4.3.2. Propagación de petróleo con velocidad climática

En el caso en que el problema tiene  $U$  constante, o se tienen identificadas las velocidades de la corriente durante el año [48], se puede resolver el problema adjunto para cada combinación de velocidades y zonas  $\Omega$  y almacenarlas, incluso es suficiente guardar los valores de la solución  $g$  solo en los puntos  $\vec{r}$  que pertenecen a la ruta del buque, y si sucede un accidente en uno de esos puntos, se pueden cargar los valores de  $g$  en ese punto para la zona  $\Omega$  de interés y utilizar la ecuación 4.17 para estimar la concentración de contaminante causada por el derrame [48].

### 4.3.3. Dependencia de la concentración $J(\phi)$ respecto a $Q(t)$

Para cuantificar el cambio en  $J(\phi)$  dada una variación en  $Q$  usando el método directo, hay que calcular la solución del problema para cada  $Q$ . Utilizando el método adjunto solo se debe resolver una vez el problema 4.10 y luego la integral descrita en la ecuación 4.17 para cada  $Q(t)$  que se quiera evaluar.

Además, se puede utilizar para conocer la relación entre la concentración  $J(\phi)$  y el tiempo que dura el derrame de petróleo, mediante la ecuación [48]

$$J(\phi) = \int_0^{t_f} g(\vec{r}_0, t) Q(t) dt$$

## 4.4. Impacto de emisiones vehiculares

Hay mucho trabajo dedicado a estudiar políticas de control de emisiones [42, 19], estimar las emisiones vehiculares [11, 4, 18, 38], y predicción de concentración de contaminantes derivados de las emisiones vehiculares [61, 22]. Hay varios modelos de transporte de contaminación en aire, tanto estadísticos[25, 33] como dinámicos[28, 62, 1].

### 4.4.1. Monóxido de Carbono

Como se menciona en la sección 1.1 en la página 6, el  $CO$  es de los contaminantes más peligrosos y abundantes generados por los automóviles, en [7] se analiza la dispersión de este contaminante en la ciudad de Guadalajara, Jalisco utilizando el modelo directo de la ecuación 2.36, así como el modelo adjunto de la ecuación 3.25 para estimar el efecto de la emisión de contaminantes en el centro histórico (CH) de la ciudad [54].

### 4.4.2. Modelo en dos dimensiones

De los parámetros utilizados en las ecuaciones 2.36 y 3.25, se ha encontrado en experimentos numéricos que la parametrización  $\sigma\phi$  es bastante buena para modelar deposición o degradación de monóxido de carbono, dióxido de azufre, plomo y carbón [44]. En el caso de las funciones  $\mu(\vec{r})$  y  $\sigma(\vec{r})$ , se ha encontrado que son muy complicadas de estimar exactamente, por lo cual se suelen aproximar a valores constantes en toda la región [27].

Para el término de advección  $\vec{U} \cdot \nabla\phi$  se han corrido experimentos numéricos con dos tipos de viento climáticos, vientos de temporada de lluvia (junio-septiembre), y vientos de temporada seca (octubre-mayo)[6]. Las fuentes de contaminantes fueron aproximadas siguiendo la metodología de la Agencia de Protección Ambiental de EEUU [11], el cual estima las emisiones de distintas clases de automóviles de acuerdo a su peso y kilometraje, tomando esta información junto con el reporte [4] para las avenidas Avenida Vallarta (puntos V1-V15), Avenida Lázaro Cárdenas (LC1-LC14), Calzada Independencia (CI1-CI15), Avenida López Mateos (LM1-LM8) y Avenida Javier Mina (J1-J5). Se obtiene que el intervalo de emisión en estas avenidas es de  $17.8g/s - 28.9g/s$  donde el máximo corresponde a la glorieta Minerva y la Avenida Lázaro Cárdenas [54].

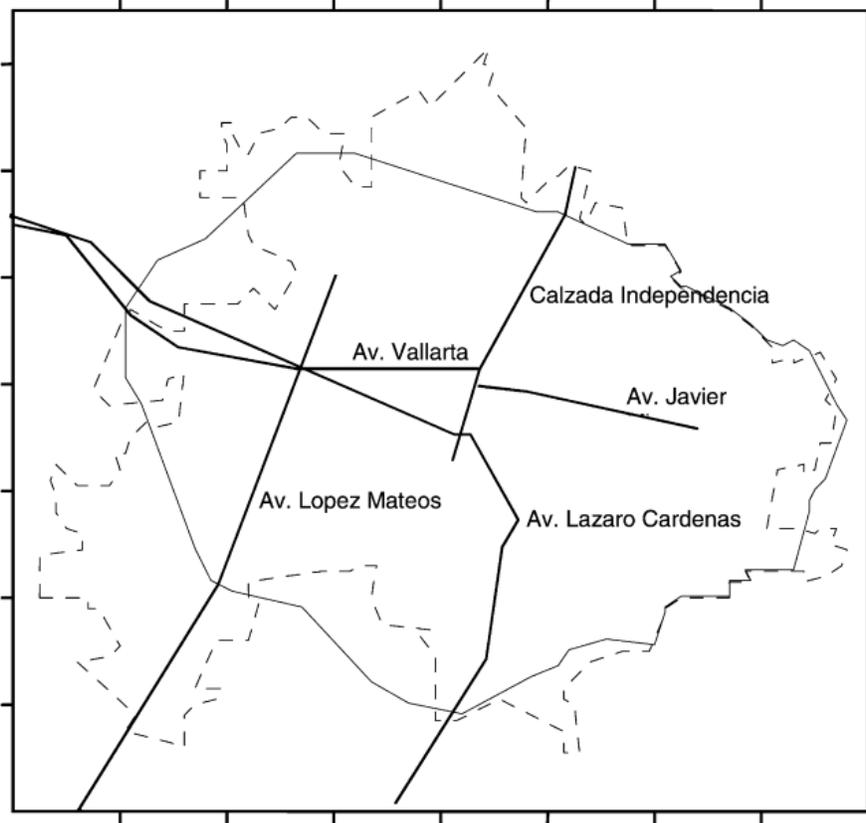


Figura 4.3: Diagrama de las avenidas de la ciudad de Guadalajara consideradas como fuentes lineales de CO: Avenida Vallarta, Avenida Lázaro Cárdenas, Calzada Independencia, Avenida López Mateos y Avenida Javier Mina [54].

Definiendo las fuentes de contaminantes como las avenidas de Guadalajara, tenemos  $i$  fuentes lineales  $R_i$  que corresponden a los lugares geométricos de las avenidas como se muestra en la figura 4.3. La intensidad de las fuentes se define con la función  $Q_i(\vec{r}, t)$ , de forma que la emisión total de una calle está dada por [5]

$$\int_{R_i} Q_i(\vec{r}, t) dl$$

Y al sustituir e integrar en la ecuación 2.36 obtenemos de forma similar a la ecuación 2.48

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi d\vec{r} = \sum_{i=1}^L \int_{R_i} Q_i(\vec{r}, t) dl - \int_D \sigma \phi d\vec{r} - \int_{S^+} U_n \phi dS$$

Esta ecuación describe la evolución temporal de la cantidad total de contaminante en el dominio. Si el problema 2.48 se multiplica por  $\phi$ , de la misma forma que en la ecuación

2.50, se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi^2 d\vec{r} = 2 \sum_{i=1}^L \int_{R_i} Q_i(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}, t) dl - 2 \int_D (\sigma \phi^2 + \mu |\nabla \phi|^2) d\vec{r} - \int_S |U_n| \phi^2 dS$$

De acuerdo con estas ecuaciones, la concentración total de contaminante aumenta directamente con la intensidad de las fuentes, y decrecen si aumentan los parámetros  $\sigma$  o  $\mu$ , así como la velocidad del viento  $U_n$  en la frontera.

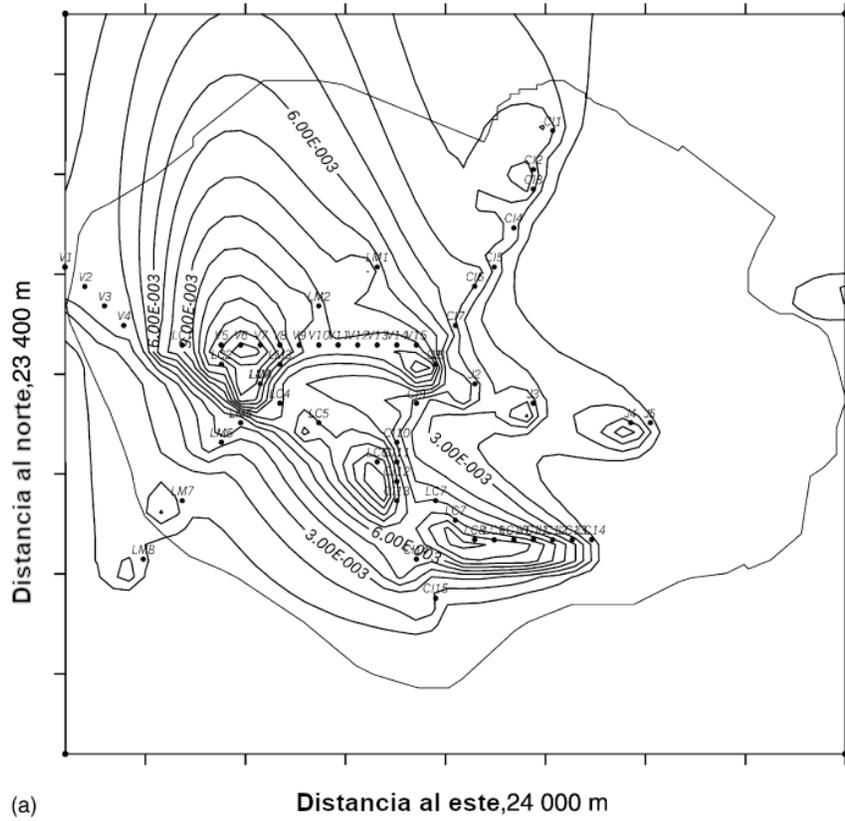
Para resolver este problema numéricamente, el dominio D se sustituye por una malla, con los puntos  $\vec{r}_{ij}$ , de forma que las fuentes lineales se pueden proyectar sobre la malla y quedar de la forma

$$f(\vec{r}, t) \equiv \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^{N_i} Q_{ij}(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_{ij})$$

Sustituyendo en la relación 3.39 obtenemos:

$$J(\phi) = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^{N_i} \delta l_{ij} \int_0^T g(\vec{r}_{ij}, t) Q_{ij}(t) dt + \int_D g(\vec{r}, 0) \phi_0(\vec{r}) d\vec{r} \quad (4.18)$$

Se observa en las figuras 4.4 y 4.5 como la concentración es mayor en la cercanía de las avenidas mostradas en la figura 4.3, y como el contaminante aumenta en la dirección  $\vec{U}$  por efecto del viento, además de extenderse por el término de difusión  $\mu$



(a)

Figura 4.4: Isolíneas de la solución  $\phi(\vec{r}, t) [g/m^2]$  del problema directo 2.36 en la ciudad de Guadalajara con las principales avenidas como fuentes de contaminantes,  $T = 180min$  [54], esta solución fue calculada para un viento climático de temporada húmeda, con una velocidad de  $3.5 \frac{m}{s}$  y dirección del sureste hacia oeste. El coeficiente de difusión utilizado fue  $\mu = 600 \frac{m^2}{s}$ , la difusión causa la extensión del área mostrado por las curvas de nivel.

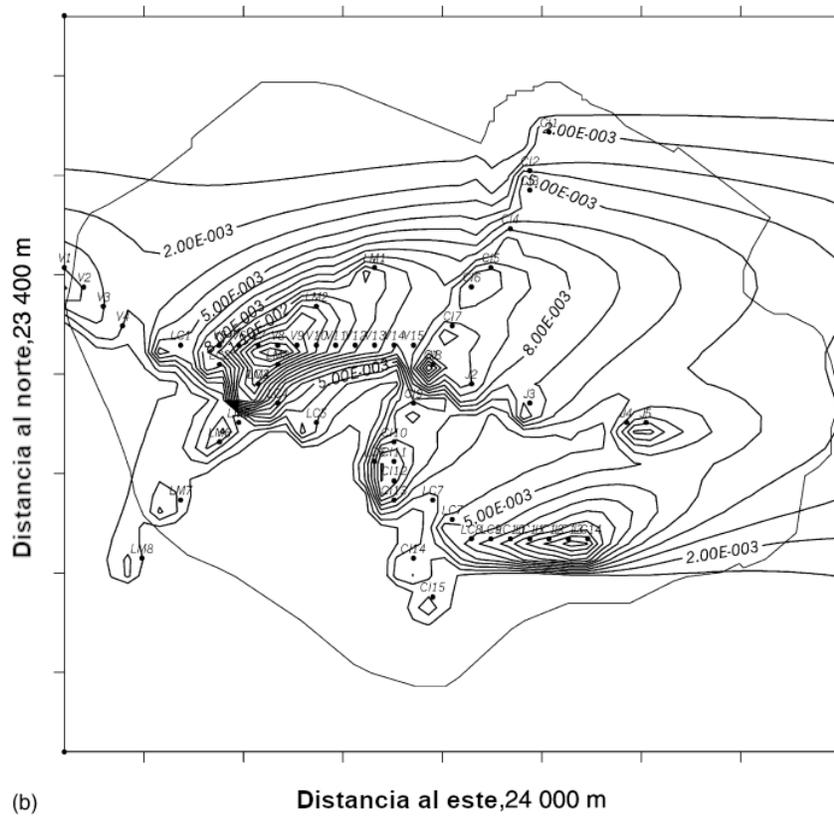


Figura 4.5: Isolíneas de la solución  $\phi(\vec{r}, t)[g/m^2]$  del problema directo 2.36 en la ciudad de Guadalajara con las principales avenidas como fuentes de contaminantes,  $T = 180min$  [54], esta solución fue calculada para un viento climático de temporada seca, con una velocidad de  $2.0 \frac{m}{s}$  y dirección del suroeste hacia el este. El coeficiente de difusión utilizado fue  $\mu = 350 \frac{m^2}{s}$ , la difusión causa la extensión del área mostrado por las curvas de nivel.

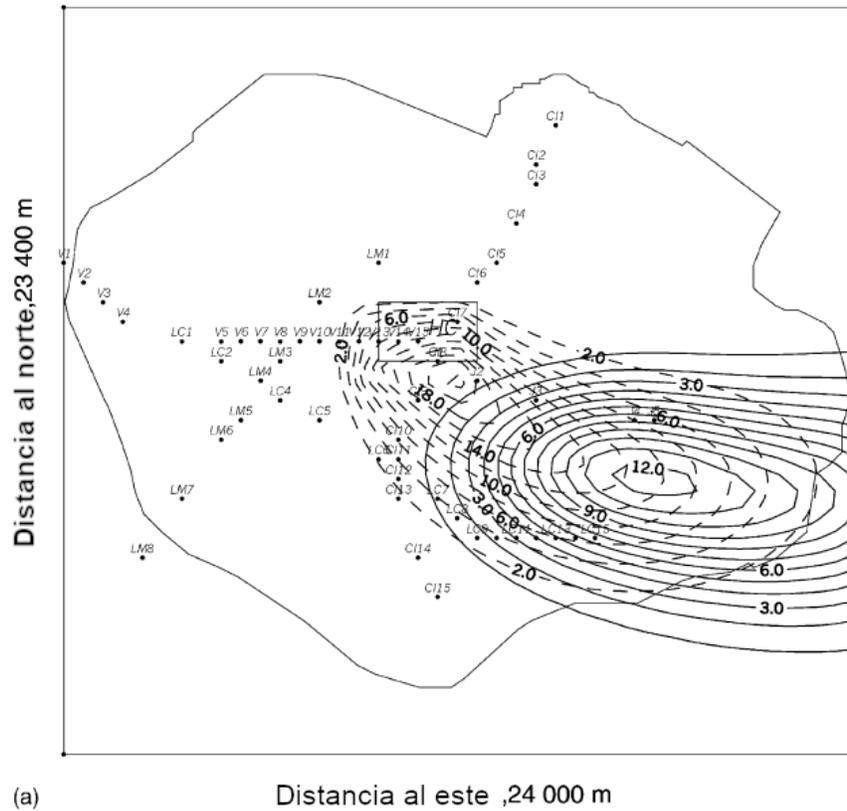
Si quisieramos definir la región del centro histórico como  $\Omega$  para estimar la concentración promedio del contaminante, la podemos expresar como

$$J(\phi) \equiv \frac{1}{\tau|\Omega|} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \phi(\vec{r}, t) d\vec{r} dt$$

Y si quisieramos conocer la contribución individual de cada avenida o punto de ésta a la concentración promedio de contaminante, tendríamos que correr un experimento con únicamente esa fuente  $R_i$ , lo cual implica un gran costo computacional.

#### 4.4.3. Solución del problema adjunto

Si el experimento numérico se hace con el problema adjunto 3.25, recordando que la evolución de éste problema se calcula “hacia atrás” (de  $t = T$  a  $t = 0$ , definiendo el forzamiento  $p(\vec{r}, t)$  de la misma forma que en 4.15 En el caso de  $g$ , llamada función de influencia, representa el peso o contribución de una fuente colocada en  $\vec{r}$  en tiempo  $t$  a la concentración de el contaminante en la región  $\Omega$ . Entonces se puede observar en la figura 4.6 que las avenidas que más contribuyen a la contaminación del centro histórico con el viento de temporada húmeda son el oriente de avenida Vallarta, Lázaro Cárdenas, Javier Mina y el sur de Calzada Independencia.



(a)

Figura 4.6: Isolneas de la solución  $g(\vec{r}, t) [1/m^2]$  del problema adjunto 3.25 en la ciudad de Guadalajara con la región del centro histórico  $HC$  como forzamiento  $p$ , las líneas punteadas representan isolneas de  $g$  en  $t = T - 60min$ , las líneas sólidas representan isolneas de  $g$  en  $t = T - 120min$ , con  $T = 180min$  en este experimento [54], esta solución fue calculada para un viento climático de temporada húmeda, con una velocidad de  $3.5 \frac{m}{s}$  y dirección del sureste hacia oeste. El coeficiente de difusión utilizado fue  $\mu = 600 \frac{m^2}{s}$ , la difusión causa la extensión del área mostrado por las curvas de nivel. Es importante recordar que la solución del problema adjunto se obtiene con una inversión del tiempo  $t' = -t$  y de la velocidad del viento  $\vec{U}' = -\vec{U}$ , esto explica que la difusión actúe de tiempos posteriores hacia los tiempos iniciales (primero las líneas continuas y luego las líneas punteadas)

Para la temporada seca, la figura 4.7 muestra las curvas de nivel de la solución  $g$ , donde se muestra que las avenidas que más contribuyen son el sur Calzada Independencia, López Mateos, la zona oriente de avenida Vallarta, y la poniente de Lázaro Cárdenas.

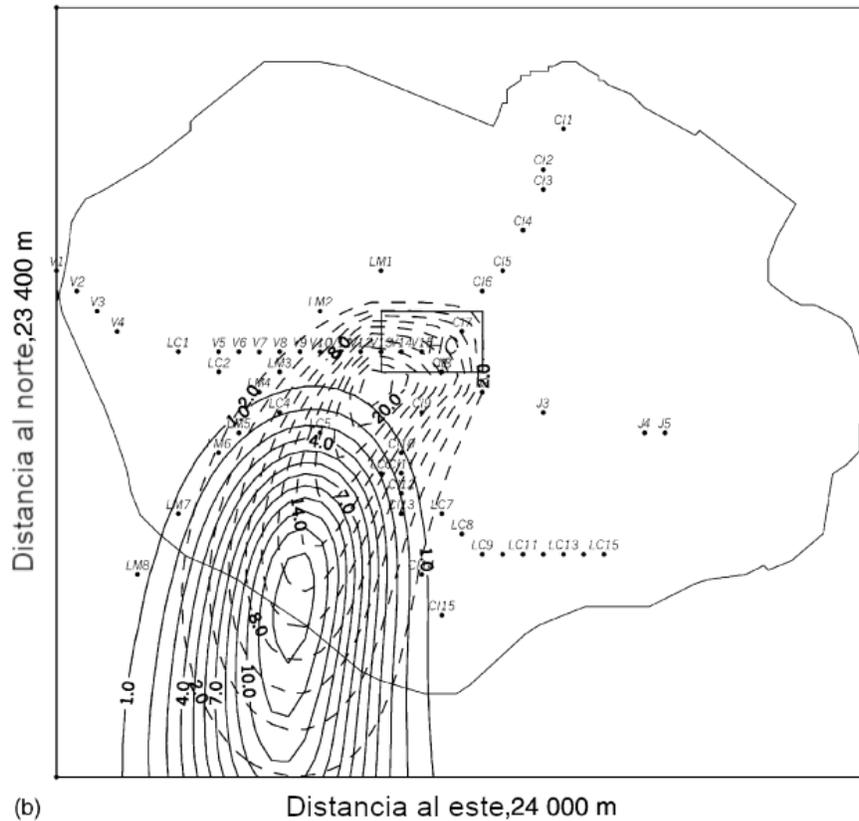


Figura 4.7: Isolíneas de la solución  $g(\vec{r}, t) [1/m^2]$  del problema adjunto 3.25 en la ciudad de Guadalajara con la región del centro histórico  $HC$  como forzamiento  $p$ , las líneas punteadas representan isolíneas de  $g$  en  $t = T - 60min$ , las líneas sólidas representan isolíneas de  $g$  en  $t = T - 120min$ , con  $T = 180min$  en este experimento [54], esta solución fue calculada para un viento climático de temporada seca, con una velocidad de  $2.0 \frac{m}{s}$  y dirección del suroeste hacia el este. El coeficiente de difusión utilizado fue  $\mu = 350 \frac{m^2}{s}$ , la difusión causa la extensión del área mostrado por las curvas de nivel. Es importante recordar que la solución del problema adjunto se obtiene con una inversión del tiempo  $t' = -t$  y de la velocidad del viento  $\vec{U}' = -\vec{U}$ , esto explica que la difusión actúe de tiempos posteriores hacia los tiempos iniciales (primero las líneas continuas y luego las líneas punteadas)

La expresión formal de la relación entre  $g$  y las fuentes de contaminante está dada por la ecuación 4.18 [54].

Las figuras 4.8-4.15 muestran el valor de la solución adjunta  $g$  para los puntos característicos de las avenidas analizadas, cada figura corresponde a una avenida, y cada curva representa el valor de  $g$  en el tiempo de ese punto de la avenida. Una curva con altos valores de  $g$  implica que ese punto de la avenida tiene una fuerte influencia

en la concentración del contaminante en la zona  $\Omega$ .

Para el caso de viento en temporada húmeda se puede observar en la figura 4.11 que los valores mas altos se encuentran en los puntos  $J1$  y  $J2$  de la avenida Javier Mina, así como en los puntos  $V14$  y  $V15$  de la avenida Vallarta (figura 4.10), y los puntos  $CI7$  y  $CI8$  de la Calzada Independencia (figura 4.9), también se puede observar en (figura 4.8) como la influencia de la avenida Lázaro Cárdenas es muy poca comparada con las demás avenidas. En temporada seca, la dirección del viento cambia de dirección (hacia el oeste), y esto modifica la influencia de las avenidas en el centro histórico, en esta temporada el punto  $V12$  de la avenida Vallarta tiene una contribución grande (figura 4.14), y en temporada húmeda su influencia es muy pequeña (figura 4.10). Para la avenida Vallarta, los puntos  $V11$  a  $V15$  tienen una influencia grande, así como el punto  $LC5$  de la avenida Lázaro Cárdenas [54].

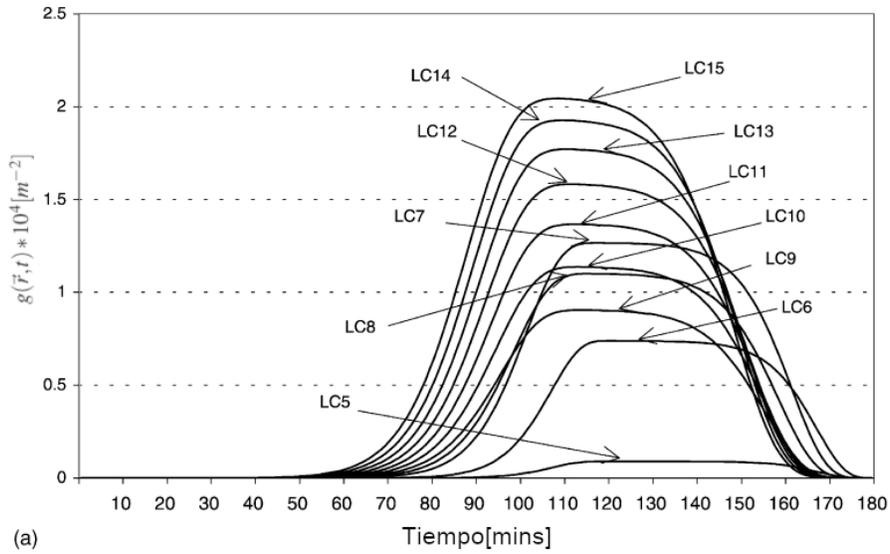


Figura 4.8: Valor de  $g(\vec{r}, t) * 10^4 [m^{-2}]$  contra el tiempo para la avenida Lázaro Cárdenas en temporada húmeda [54]

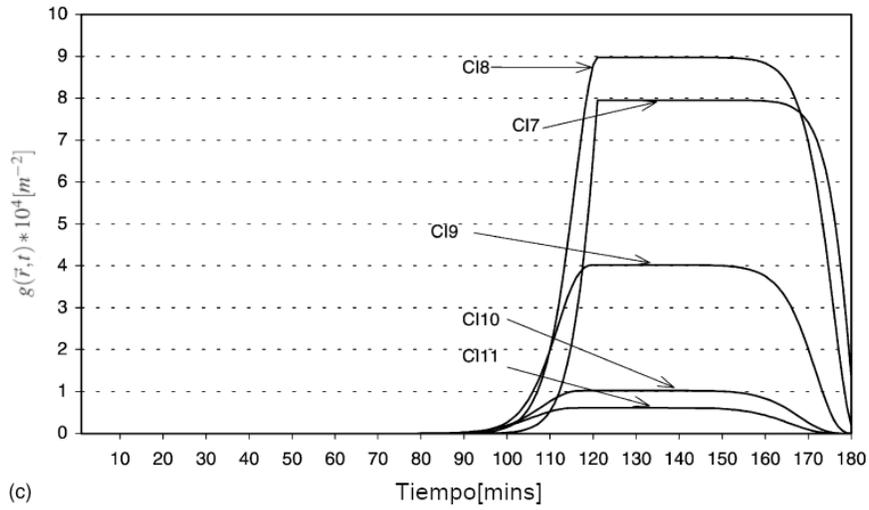


Figura 4.9: Valor de  $g(\vec{r}, t) [1/m^2]$  contra el tiempo para la avenida Calzada Independencia en temporada húmeda [54]

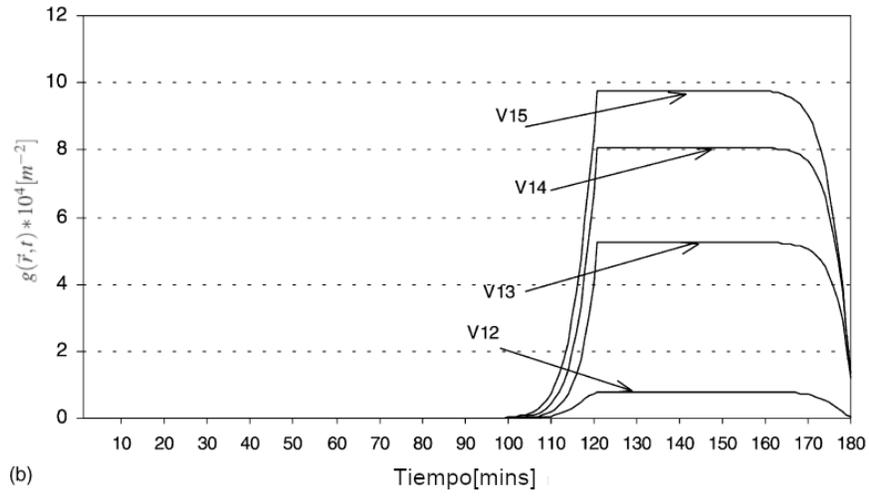


Figura 4.10: Valor de  $g(\vec{r}, t) [1/m^2]$  contra el tiempo para la avenida Vallarta en temporada húmeda [54]

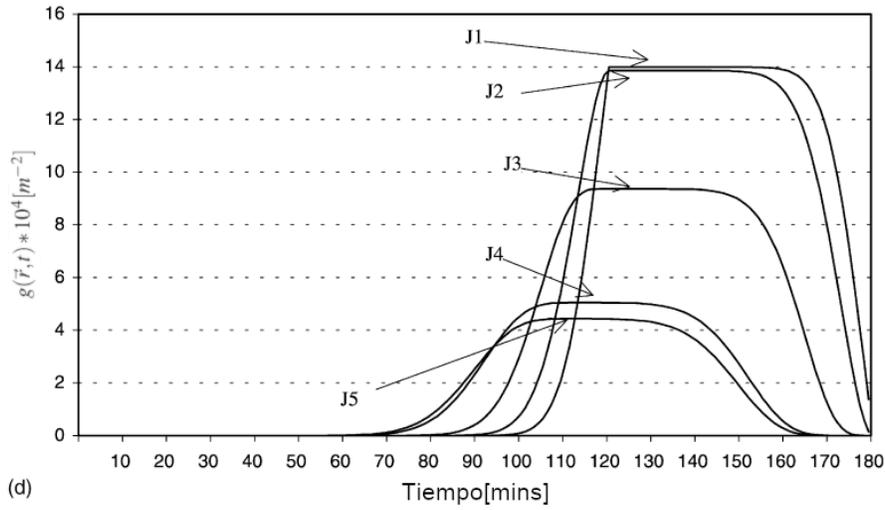


Figura 4.11: Valor de  $g(\vec{r}, t) [1/m^2]$  contra el tiempo para la avenida Javier Mina en temporada húmeda [54]

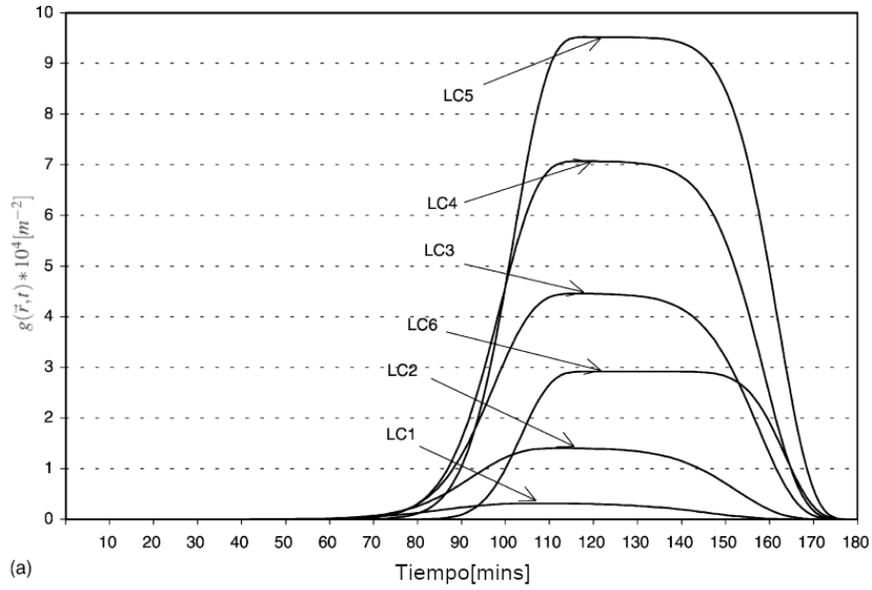


Figura 4.12: Valor de  $g(\vec{r},t)[1/m^2]$  contra el tiempo para la avenida Lázaro Cárdenas en temporada seca [54]

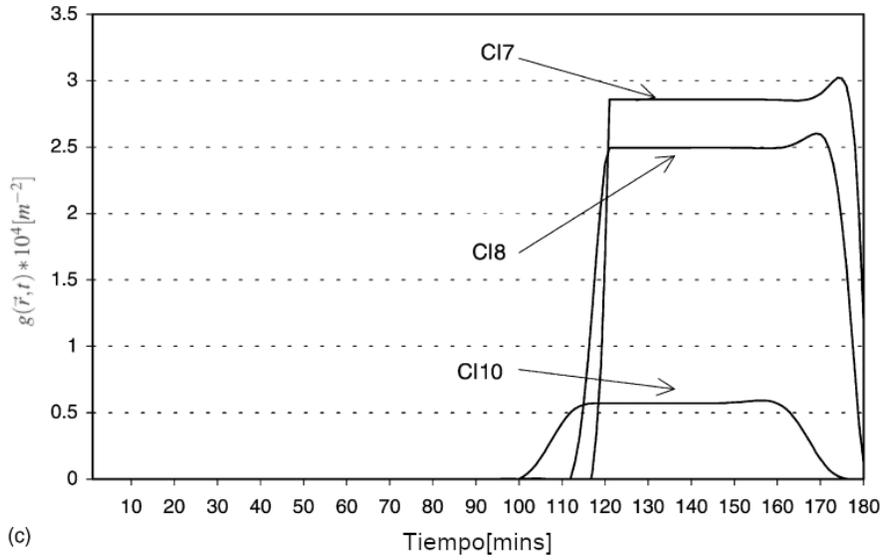


Figura 4.13: Valor de  $g(\vec{r},t)[1/m^2]$  contra el tiempo para la avenida Calzada Independencia en temporada seca [54]

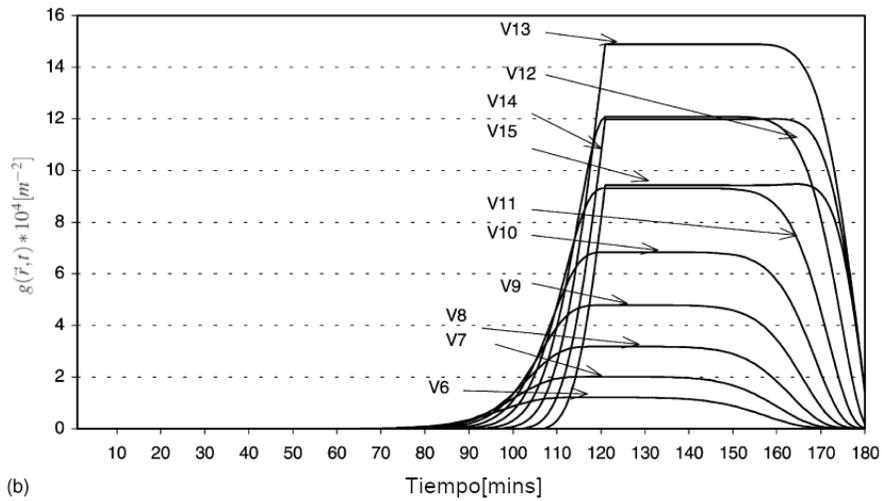


Figura 4.14: Valor de  $g(\vec{r}, t)[1/m^2]$  contra el tiempo para la avenida Vallarta en temporada seca [54]

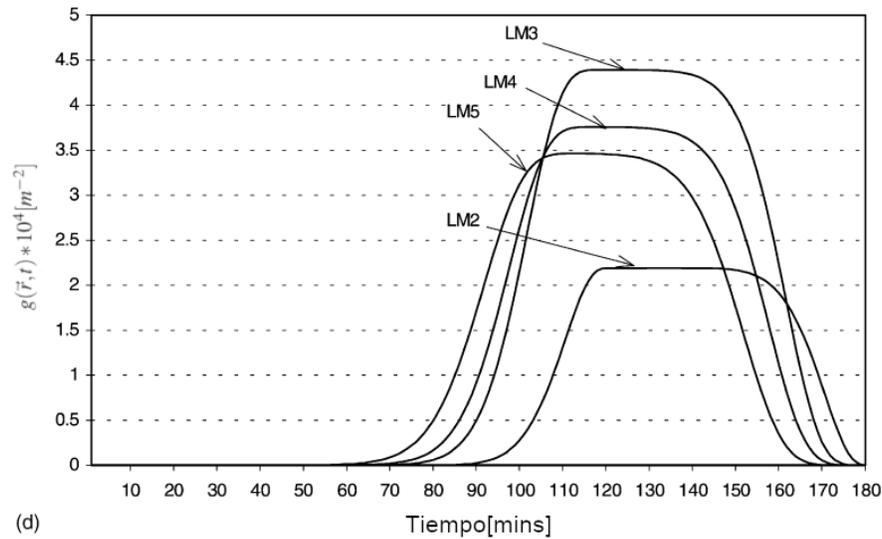


Figura 4.15: Valor de  $g(\vec{r}, t)[1/m^2]$  contra el tiempo para la avenida López Mateos en temporada seca [54]

En éstas figuras la función de influencia en los primeros valores de  $t$  son bajos dado a que la influencia de estos puntos tarda en llegar a el área de interés, entonces solo las emisiones del final de la gráfica (es decir, las primeras emisiones de la fuente) contribuyen a la estimación.

## 4.5. Detección de fábricas que violan tasas de emisión

Una aplicación importante de estas técnicas consiste en encontrar que fuente de contaminantes está emitiendo más de lo permitido por una regulación ambiental, estas regulaciones tienen la finalidad de que la concentración promedio de un contaminante  $J_0$  no sobrepase un límite que afecte la salud de los habitantes en una región  $\Omega$ .

La figura 4.16 muestra las soluciones al problema adjunto 3.25 para distintas regiones de interés de la ciudad de Guadalajara, y distintos vientos climáticos. Estas soluciones se utilizan para estimar el impacto de las fábricas que se muestran etiquetadas desde A hasta la M.

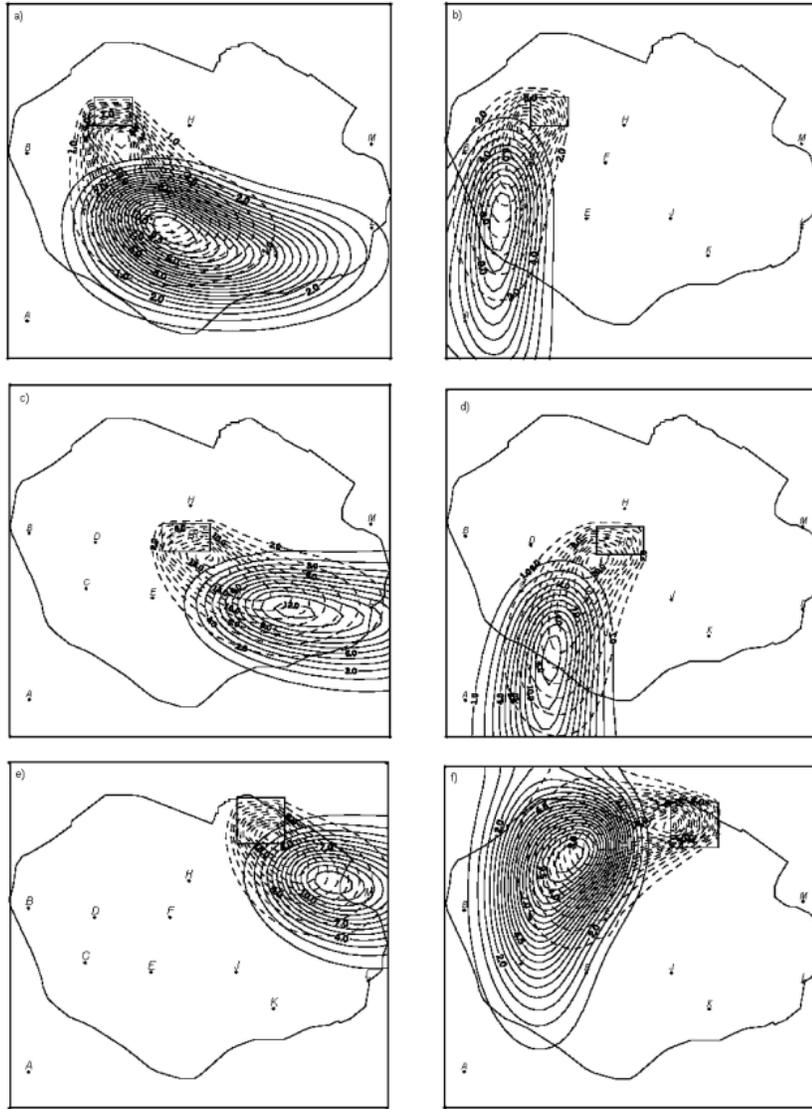


Figura 4.16: Isolíneas de la solución  $g(\vec{r}, t)$  al problema adjunto para 3 regiones  $\Omega_k$  de interés: Parque Colomos (a,b), Centro Histórico (c,d) y Jardín Zoológico (e,f) para dos vientos estacionales, el de temporada húmeda con dirección de sureste hacia oeste (a, c, e) y el de temporada seca con dirección de suroeste hacia este (b, d, f). Las líneas punteadas representan isolíneas para  $t = T - 60min$  y las sólidas para  $t = T - 90min$ ,  $T = 360min$  [52]. Es importante notar que la solución del problema adjunto se obtiene con una inversión del tiempo  $t' = -t$  y de la velocidad del viento  $\vec{U}' = -\vec{U}$ , esto explica que la difusión actúe de tiempos posteriores hacia los tiempos iniciales (primero las líneas contínuas y luego las líneas punteadas)

Para una concentración descrita por  $\phi$  en una región  $\Omega$  el valor promedio de el contaminante está dado por [51]

$$J(\phi) = \frac{1}{\tau|\Omega|} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \phi(r,t) dr dt \quad (4.19)$$

O su equivalente formulado con la solución del problema adjunto

$$J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(r_i,t) Q_i(t) dt + \int_D g(r,0) \phi^0(r) dr \quad (4.20)$$

Supongamos que en una región  $D$  hay  $N$  fábricas con su correspondiente función de emisión  $Q_i(t)$  para  $i = 1, 2, \dots, N$  y después de un estudio se determinan valores máximos de emisión para cada fábrica denotados por  $\bar{Q}_i(t)$  [37].

#### 4.5.1. Tasas de emisión invariables

Siendo  $Q_i$  la tasa de emisión de la  $i$ ésima fábrica antes de imponer un límite, y  $\bar{Q}_i$  la tasa de emisión constante después de imponer los límites. Definiendo  $J(\phi)$  como el valor de concentración promedio de contaminante obtenido mediante un modelo de difusión del tipo descrito en la ecuación 3.25 para las fuentes  $Q_i$ , y definiendo  $\bar{J}(\phi)$  mediante el mismo modelo con las fuentes constantes  $\bar{Q}_i$ . Basado en éstas funciones se pueden definir las variaciones:

$$\begin{aligned} \delta Q_i &= Q_i - \bar{Q}_i \\ \delta J(\phi) &= J(\phi) - \bar{J}(\phi) \end{aligned} \quad (4.21)$$

Dado que las condiciones iniciales están dadas  $\phi(\vec{r}, 0) \equiv 0$ , de las ecuaciones 4.20 y 4.21 se obtiene [51]

$$\delta J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(r_i,t) \delta Q_i(t) dt \quad (4.22)$$

Si se tienen  $N$  fábricas, y  $K$  zonas de interés  $\Omega_k$ , se pueden estimar mediante un experimento los valores de  $\delta J_k(\phi)$  (la diferencia entre el valor común estimado y el valor medido) mediante la estimación adjunta, calculando las soluciones  $g_k(\vec{r}, t)$ , osea las funciones de influencia para cada región de interés.

$$\delta J_k(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g_k(\vec{r}_i,t) \delta Q_i(t) dt$$

Definiendo las tasas de emisión constantes respecto al tiempo

$$\delta J_k(\phi) = \sum_{i=1}^N \delta Q_i \int_0^T g_k(\vec{r}_i,t) dt$$

De forma que se puede describir el problema como el sistema lineal

$$\begin{aligned} G\vec{q} &= \vec{j} \\ q_i &= \delta Q_i \\ j_k &= \delta J_k(\phi) \\ g_{ki} &= \int_0^T g_k(\vec{r}_i, t) dt \end{aligned}$$

Se puede utilizar la definición 4.21 para llegar a el valor  $\bar{Q}_i = Q_i - \delta Q_i$ , de donde se puede estimar si  $\bar{Q}_i > \tilde{Q}_i$ , lo que significa que la fábrica  $i$  no está respetando los límites de emisión.

#### 4.5.2. Tasas de emisión variables

Para el caso de tasas de emisión variables, de acuerdo con 4.22 el valor promedio de un contaminante en  $\Omega_k$  es

$$\delta J_k(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g_k(\vec{r}_i, t) \delta Q_i(t) dt$$

Dado que las funciones  $g_k(\vec{r}_i, t)$  son continuas y no negativas, y usando el teorema del valor medio existe  $\delta Q_i^*$  tal que

$$\int_0^T g_k(\vec{r}_i, t) \delta Q_i(t) dt = \delta Q_i^* \int_0^T g_k(\vec{r}_i, t) dt$$

Lo que significa que el mismo método 4.5.1 se puede utilizar para estimar una tasa de emisión  $\delta Q_i^*$  que aproxima el promedio de emisión de esa fuente en el intervalo  $[0, T]$ . En caso de que el número de fuentes y el de áreas de interés coincida  $K = N$ , la matriz  $A$  es cuadrada y es importante calcular su número de condición  $\nu(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$ , que nos va decir que tan estable es la solución de el problema lineal ante errores de redondeo. Cuando se cumple  $\|B\| = \|E - A\| < 1$  en alguna norma, se puede calcular el número de condición con la relación [49]

$$\nu(A) = \|A\| \|A^{-1}\| \leq \frac{1 + \|E\|}{1 - \|B\|}$$

Si la matriz no cumple la condición  $\|B\| < 1$ , el número de condición se puede estimar con la regla [50]

$$\nu(A) = \|A\| \|A^{-1}\| \geq \frac{\|\vec{\epsilon}\| / \|\vec{x}\|}{\|\vec{\delta}\| / \|\vec{b}\|}$$

$\vec{\epsilon}$  y  $\vec{\delta}$  están dados por

$$A(\vec{x} + \vec{\epsilon}) = \vec{b} + \vec{\delta}$$

De tal forma que se puede estimar  $\nu$  generando vectores  $\vec{x}$  y  $\epsilon$ . Si se elijen las zonas  $\Omega_k$  de tal forma que cada una contiene solamente una fábrica favorece a que el número

de condición  $v(A)$  sea pequeño, ésto se puede visualizar pensando en el caso en que no hay intersecciones entre las regiones  $\Omega_k$ , y el intervalo  $(0, T)$  es muy pequeño, entonces las isolíneas de la solución  $g_k(\vec{r}, t)$  estarían cerca de  $\Omega_k$ , es decir que cada fuente de contaminante queda relacionada fuertemente con su región, lo que hace que la matriz  $A$  sea de diagonal estrictamente dominante [51]:

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$$

En caso que el número de regiones sea mayor al número de fábricas ( $K > N$ ), la matriz  $A$  es rectangular y se puede resolver por medio de el método de mínimos cuadrados [51]

$$\vec{x} = (A^T A)^{-1} A^T \vec{b}$$

Si es más fácil hacer una medición de  $K$  puntos en lugar de estimar el promedio en regiones, se puede utilizar esa medición como el promedio en tiempo del contaminante en ese punto [51]

$$J_k(\phi) = \frac{1}{\tau} \int_{T-\tau}^T \phi(c_k, t) dt$$

La solución del problema adjunto para estas regiones de interés se calcula la solución al problema 3.25 con el forzamiento  $p_k$  [51]

$$p_k(\vec{r}, t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau}, & \vec{r} = c_k \text{ y } t \in (T - \tau, T) \\ 0, & \text{de otro modo} \end{cases} \quad (4.23)$$

### 4.5.3. Búsqueda de la mejor ubicación para una fábrica nueva

Una aplicación importante del método adjunto consiste en encontrar la mejor ubicación para una nueva fuente de contaminantes. Supongamos que hay  $N$  plantas emisoras, cuyas ubicaciones están denotadas por  $\vec{r}_i$  y las intensidades de emisión de estas están dadas por  $Q_i(t)$  y se quiere instalar una nueva fábrica  $i = 0$  con una tasa de emisión  $Q_0(t)$  acotada por [52]

$$Q_0 = \max_{0 \leq t \leq T} Q_0(t)$$

Y se quiere encontrar la ubicación óptima  $\vec{r}_0$  de la nueva planta. El primer paso es elegir  $K$  zonas  $\Omega_k$ , y se busca que la concentración media de contaminante en cada región cumpla

$$J_k < J_0 \quad (4.24)$$

Donde  $J_0$  es la norma sanitaria que define la máxima concentración de contaminante. Para simplificar los cálculos, se ignora la concentración inicial de contaminantes y se define  $\phi_0(\vec{r}) \equiv 0$ , que junto con 3.39 obtenemos

$$J_k = \sum_{i=0}^N \int_0^T g_k(\vec{r}_i, t) Q_i(t) dt \quad (4.25)$$

Como estimación de la concentración en la región  $\Omega_k$  cuando las  $N + 1$  plantas emiten contaminantes, y definimos la emisión de contaminantes para las  $N$  fuentes, excluyendo la nueva con

$$\tilde{J}_k = \int_{i=1}^N \sum_0^T g_k(\vec{r}_i, t) Q_i(t) dt \quad (4.26)$$

Con la diferencia entre las ecuaciones 4.25 y 4.26, y sustituyendo en la ecuación 4.24 obtenemos

$$\int_0^T g_k(\vec{r}_0, t) Q_0(t) dt \leq J_0 - \tilde{J}_k = \bar{J}_k \quad (4.27)$$

Que requiere

$$\int_0^T g_k(\vec{r}_0, t) dt \leq \frac{\bar{J}_k}{Q_0}$$

Para cumplir con la ecuación 4.24 podemos separar el dominio  $D$  usando la función [52]

$$F_k(\vec{r}) = \int_0^T g_k(\vec{r}, t) dt$$

Con una isolínea

$$F_k(\vec{r}) = \frac{\bar{J}_k}{Q_0}$$

De tal forma que divida el subdominio  $D_k$  que cumple la ecuación 4.27 y por lo tanto cumple la ecuación 4.24 y el subdominio que no lo cumple  $D \setminus D_k$ . Repitiendo este procedimiento para las  $K$  regiones, se puede obtener su intersección

$$\tilde{D} = \bigcap_{k=1}^K D_k$$

La cual garantiza que la concentración de contaminante cumple la norma. De igual forma se puede repetir este procedimiento para varios parámetros, como intensidad y dirección del viento, por ejemplo se puede calcular para vientos de temporada húmeda  $\tilde{D}_{humeda}$  y temporada seca  $\tilde{D}_{seca}$ , y calcular  $\tilde{D} = \tilde{D}_{humeda} \cap \tilde{D}_{seca}$ , que indica el subdominio donde se cumpliría la norma sanitaria en todas las regiones, para ambos vientos [52].

La figura 4.17 muestra las zonas de interés junto a las soluciones adjuntas para dos vientos climáticos, las áreas sombreadas representan las zonas que no cumplirán con la norma sanitaria para alguna región de interés, por lo que una planta nueva debería colocarse en un punto que no corresponda a ninguna región sombreada.

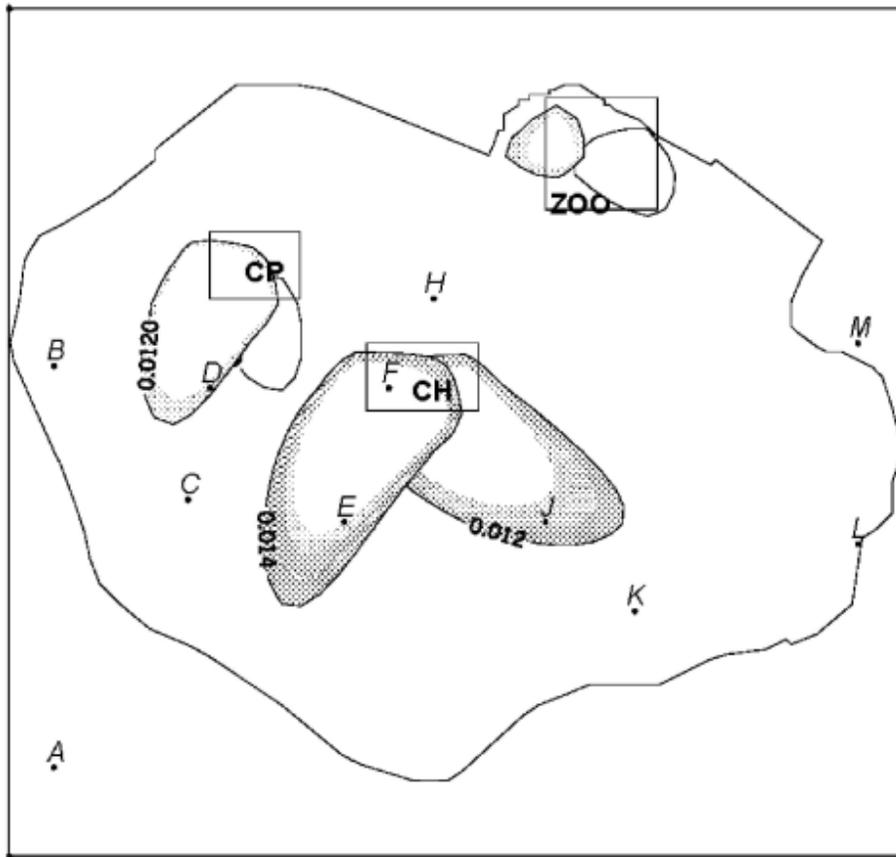


Figura 4.17: La zona sin sombreada corresponde a  $\tilde{D}_k$ , la intersección de dominios  $D_k$  para cada uno de los 3 dominios de interés y los dos tipos de viento estacional, con 11 fuentes de contaminantes (A-M) con  $Q_i(t) = 60gs^{-1}$ . Entonces la zona no sombreada indica la zona ideal para poner una planta emisora de contaminantes. Los números que acompañan las isólinas de las regiones sombreadas corresponden a el valor de  $F_k(\vec{r})$  multiplicado por  $10^4$

## Conclusiones

El modelo matemático que describe la concentración de un contaminante bajo efectos de advección por viento, dispersión y decaimiento mostró tener las características necesarias de estabilidad, unicidad de la solución y significado físico tal que es una buena herramienta para estimar y prevenir situaciones que representan un problema a la salud, ya sea mediante sus variantes simplificadas que tienen una solución analítica conocida en función de las condiciones iniciales y condiciones de frontera, o mediante la solución numérica de su modelo adjunto.

Se observó que resolver el problema adjunto para una configuración de coeficientes, y definiendo una región de interés, permite posteriormente conocer la concentración promedio del contaminante en esa región en función de la intensidad y posición de las fuentes mediante un proceso de cómputo mucho más rápido que la resolución del modelo directo, y se describieron algunas aplicaciones prácticas donde esa propiedad abre el paso a técnicas muy útiles de evaluación y prevención de riesgo, así como la detección de altas tasas de emisión por parte de una fuente. Estas técnicas pueden usarse para reducir la exposición de una población a las emisiones contaminantes de automóviles, fábricas o accidentes ambientales.

# Bibliografía

- [1] J. Brandt y col. «Operational air pollution forecast modelling using the THOR system». En: *Physics and Chemistry of the Earth, Part B: Hydrology, Oceans and Atmosphere* 26 (2001), págs. 117-122.
- [2] Maurizio Caselli. *La contaminación atmosférica*. Siglo XXI, 1996.
- [3] Ruel V. Churchill y James Ward Brown. *Fourier Series and Boundary Value Problems*. McGraw-Hill, 2008.
- [4] COESE. *Factores de emisión para vehículos automotores*. Comisión Estatal de Ecología, Gobierno del Estado de Jalisco, 1995.
- [5] V. Davydova-Belitskaya. «Modelación matemática de los niveles de contaminación en la Ciudad de Guadalajara, Jalisco, México». Tesis para obtener el grado académico de Doctora en Ciencias (Física Atmosférica), Posgrado en Ciencias de la Tierra. Tesis doct. Universidad Nacional Autónoma de México, 2001.
- [6] V. Davydova-Belitskaya y Yuri N. Skiba. «Climate of Guadalajara city (Mexico); its variation and change within latest 120 years». En: *World Resource Review* 11 (1999), págs. 258-270.
- [7] V. Davydova-Belitskaya y col. «Modelación matemática de los niveles de contaminación en la Ciudad de Guadalajara, Jalisco, México. Parte II: Modelo numérico de transporte de contaminantes y su adjunto». En: *Revista Internacional de Contaminación Ambiental* 17 (1999), págs. 97-107.
- [8] X. Doménech. *Química de la contaminación*. Miraguano Ediciones, 1999.
- [9] A.J. Elliot. «Shear Diffusion and the Spread of Oil in the Surface Layers of the North Sea». En: *Deutsche Hydrographische Zeitung* 39 (1986), págs. 113-137.
- [10] A.J. Elliot, A.C. Dale y R. Proctor. «Modelling the Movement of Pollutants in the UK Shelf Seas». En: *Marine Pollution Bulletin* 24 (1992), págs. 614-619.
- [11] EPA-450/4-81-026d. *Procedures for Emission Inventory Preparation, Volume IV: Mobile Sources*. United States Environmental Protection Agency, 1992.
- [12] Diario Oficial de la Federación. *Criterio para evaluar la calidad del aire ambiente, con respecto a las partículas suspendidas PM10 y PM2.5. Valores normados para la concentración de partículas suspendidas PM10 y PM2.5 en el aire ambiente, como medida de protección a la salud de la población*. 27/10/2021.

- [13] Diario Oficial de la Federación. *Criterio para evaluar la calidad del aire ambiente, con respecto al dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>). Valores normados para la concentración de dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>) en el aire ambiente, como medida de protección a la salud de la población.* 20/08/2019.
- [14] Diario Oficial de la Federación. *Criterio para evaluar la calidad del aire ambiente, con respecto al dióxido de nitrógeno (NO<sub>2</sub>). Valores normados para la concentración de dióxido de nitrógeno (NO<sub>2</sub>) en el aire ambiente, como medida de protección a la salud de la población.* 27/10/2021.
- [15] Diario Oficial de la Federación. *Criterio para evaluar la calidad del aire ambiente, con respecto al monóxido de carbono (CO). Valores normados para la concentración de monóxido de carbono (CO) en el aire ambiente, como medida de protección a la salud de la población.* 29/10/2021.
- [16] Diario Oficial de la Federación. *Criterio para evaluar la calidad del aire ambiente, con respecto al ozono (O<sub>3</sub>). Valores normados para la concentración de ozono (O<sub>3</sub>) en el aire ambiente, como medida de protección a la salud de la población.* 28/10/2021.
- [17] John Fritz. *Partial Differential Equations*. Springer, 1982.
- [18] L.X. Fu y col. «Assessment of vehicular pollution in China». En: *Air & Waste Management Association* 51 (2001), págs. 658-668.
- [19] H.C. Goddard. «Promoting urban sustainability: The case for a tradable supplementary license system for vehicle use». En: *Acta Numerica* 3 (1999), págs. 2317-2331.
- [20] Richard Haberman. *Applied Partial Differential Equations with Fourier Series and Boundary Value Problems*. Pearson Education, 1983.
- [21] J. Hadamard. *Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations*. Yale University Press, 1923.
- [22] A.A. Hassan y J.M. Crowther. «A simple model of pollutant concentrations in a street canyon». En: *Environmental Monitoring and Assessment* 52 (1998), págs. 269-280.
- [23] M.K. Hill. *Understanding of Environmental Pollution*. Cambridge University Press, 1997.
- [24] P.V. Hobbs. *Introduction to Atmospheric Chemistry*. Cambridge University Press, Reino Unido, 2000.
- [25] E. Klimova-Murphy y B.E.A. Fisher. «Application of a long-range transport model for the assessment of air quality on a local scale». En: *International Journal of Environment and Pollution* 8 (1997), págs. 408-419.
- [26] A.N. Kolmogorov y S.V. Fomin. *Elements of the Theory of Functions and Functional Analysis*. Graylock Press, 1957.
- [27] J.Y. Ku, S.F. Rao y K.Sh. Rao. «Numerical simulation of air pollution in urban areas: Model development». En: *Atmospheric Environment* 21 (1987), págs. 201-212.
- [28] M. Liu y J.J. Callor. «A high-resolution air pollution model suitable for dispersion studies on complex terrain». En: *Monthly Weather Review* 124 (1996), págs. 2396-2409.

- [29] G.I. Marchuk. *Mathematical Models in Environmental Problems*. Elsevier, 1986.
- [30] G.I. Marchuk. *Numerical Solution of Problems of the Dynamics of Atmosphere and Ocean*. ruso. Gigrometeoizdat, 1975.
- [31] G.I. Marchuk y Yuri N. Skiba. «Numerical calculation of the conjugate problem for a model of the thermal interaction of the atmosphere with the ocean and continents». En: *Izvestiya Atmospheric and Oceanic Physics* 12 (1976), págs. 279-284.
- [32] G.I. Marchuk y Yuri N. Skiba. «On a model for predicting the mean temperature anomalies». ruso. En: *USSR Academy of Sciences, Novosibirsk* 120 (1978), págs. 1-140.
- [33] E. Murphy-Klimova, B.E.A. Fisher y R. Sokhi. «Treatment of urban areas within a regional transport model of sulphur and nitrogen oxides». En: *Environmental Monitoring and Assessment* 52 (1998), págs. 213-224.
- [34] D. Parra-Guevara y Yuri N. Skiba. «A Linear-Programming-Based Strategy for Bioremediation of Oil-Polluted Marine Environments». En: *Environmental Modeling & Assessment* 18.2 (2013), págs. 135-146.
- [35] D. Parra-Guevara y Yuri N. Skiba. «A strategy for bioremediation of marine shorelines polluted with oil by using several nutrient release points». En: *Mathematical Modelling and Numerical Simulation of Oil Pollution Problems*. Ed. por Matthias Ehrhardt. The Reacting Atmosphere 2. Springer International Publishing, 2015. Cap. 2.
- [36] D. Parra-Guevara y Yuri N. Skiba. «Elements of the Mathematical Modelling in the Control of Pollutants Emissions». En: *Ecological Modelling* 167 (2003), págs. 263-275.
- [37] D. Parra-Guevara y Yuri N. Skiba. «On optimal solution of an inverse air pollution problem: Theory and numerical approach». En: *Mathematical and Computer Modelling* 43 (2006), págs. 766-778.
- [38] D.D. Parrish y col. «Decadal change in carbon monoxide to nitrogen oxide ratio in US vehicular emissions». En: *Geophysical Research: Atmospheres* 107 (2002).
- [39] M. Reed y B. Simon. *Functional Analysis I*. Academic Press, Inc, 1980.
- [40] H.J. Reid y J. Vaughan. «Convective mixing in a tropopause fold». En: *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 130 (2004), págs. 1195-1212.
- [41] K. Rektorys. *Variational Methods in Mathematics, Science and Engineering*. Reidel Publishing Company, 1980.
- [42] F.W. Rusco y W.D. Walls. «Vehicular emissions and control policies in Hong-Kong». En: *Contemporary Economic Policy* 13 (1995), págs. 50-61.
- [43] J.H. Seinfeld. *Atmospheric chemistry and Physics of Air Pollution*. J. Wiley & Sons, 1992.
- [44] C.C. Shir y L.J. Shich. «A generalized urban air pollution model and its applications to the study of SO<sub>2</sub> distributions in the St. Louis metropolitan area». En: *Journal of Applied Meteorology* 13 (1974), págs. 185-204.

- [45] Yuri N. Skiba. «Air pollution estimates». En: *World Resource Review* 9 (1997), págs. 542-556.
- [46] Yuri N. Skiba. «Balanced and absolutely stable schemes for the main and the adjoint pollutant transport equations in the limited area». En: *Revista Internacional de Contaminacion Ambiental* 9 (1993), págs. 39-51.
- [47] Yuri N. Skiba. «Direct and adjoint oil spill estimates». En: *Environmental Monitoring and Assessment* 59 (1999), págs. 95-109.
- [48] Yuri N. Skiba. «Dual oil concentration estimates in ecologically sensitive zones». En: *Environmental Monitoring and Assessment* 43 (1996), págs. 139-151.
- [49] Yuri N. Skiba. *Introducción a los Métodos Numéricos*. DGPFE, UNAM, 2001.
- [50] Yuri N. Skiba. *Métodos y esquemas numéricos: un análisis computacional*. DGPFE, UNAM, 2005.
- [51] Yuri N. Skiba. «On a method of detecting the industrial plants which violate prescribed emission rates». En: *Ecological Modelling* 159 (2003), págs. 125-132.
- [52] Yuri N. Skiba, Parra-Guevara David y V. Davydova-Belitskaya. «Air quality assessment and control of emission rates». En: *Environmental Monitoring and Assessment* 111 (2005), págs. 89-112.
- [53] Yuri N. Skiba y V. Davydova-Belitskaya. «Air pollution estimates in Guadalajara city». En: *Environmental Modeling and Assessment* 7 (2002), págs. 153-162.
- [54] Yuri N. Skiba y V. Davydova-Belitskaya. «On the estimation of impact of vehicular emissions». En: *Ecological Modeling* 166 (2003), págs. 169-184.
- [55] Yuri N. Skiba y D.N. Filatov. «On an Efficient Splitting-Based Method for Solving the Diffusion Equation on a Sphere». En: *Numerical Methods for Partial Differential Equations* 28 (2010), págs. 331-352.
- [56] Yuri N. Skiba y D. Parra-Guevara. «Application of Adjoint Approach to Oil Spill Problems». En: *Environmental Modelling and Assessment* 22 (2017), págs. 379-395.
- [57] Yuri N. Skiba y D. Parra-Guevara. «Control of emission rates.» En: *Atmósfera* 26.3 (2013), págs. 379-400.
- [58] Yuri N. Skiba y D. Parra-Guevara. «Mathematics of oil spills: existence, uniqueness, and stability of solutions». En: *Geofísica Internacional* 38.2 (1999), págs. 117-124.
- [59] Yuri N. Skiba y David Parra-Guevara. *Introducción a los métodos de dispersión y control de contaminantes*. UNAM, 2011. ISBN: 9786070229220.
- [60] K. Wark y C.F. Warner. *Air Pollution, its origin and control*. Harper & Row, 1999.
- [61] L.E. Yu, L.M. Hildemann y W.R. Ott. «A mathematical model for predicting trends in carbon monoxide emissions and exposures on urban arterial highways». En: *Air & Waste Management Association* 46 (1996), págs. 430-440.
- [62] E.A. Zakarin y B.M. Mirkarimova. «GIS-based mathematical modelig for urban air pollution». En: *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics* 36 (2000), págs. 334-342.