



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA
CENTRO DE CIENCIAS DE LA ATMÓSFERA

PROGRAMACIÓN LINEAL APLICADA AL CONTROL
DE EMISIONES CONTAMINANTES

T E S I S

QUE COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS DE LA TIERRA
(MODELACIÓN DE SISTEMAS TERRESTRES)

P R E S E N T A

ARTURO PEREZ SESMA

JURADO EXAMINADOR

Director de tesis: DR. DAVID PARRA GUEVARA

Presidente: DR. RICARDO TORRES JARDÓN

Vocal: DR. IOURI SKIBA

Suplente: DRA. VALENTINA DAVYDOVA BELITSKAYA

Suplente: MTRO. FRANCISCO HERNÁNDEZ ORTEGA



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.

Agradecimientos

*La sabiduría comienza por honrar al Señor;
los necios desprecian la sabiduría y la instrucción.
Proverbios 1:7*

- *A Dios por la vida y el entendimiento.*
- *Al Dr. David Parra Guevara por su gran apoyo y paciencia a lo largo del desarrollo de este trabajo.*
- *A mi esposa e hija que se han dado sentido a mi vida.*
- *A las sugerencias de la comisión revisora*

Índice

Resumen	1
----------------	---

Capítulo 1

Introducción

1.1	Justificación	3
1.2	Objetivo general	3
1.2.1	Hipótesis	4
1.2.2	Objetivos específicos	4
1.3	Generalidades	4
1.4	Contaminación atmosférica	5
1.5	Dispersión de los contaminantes en la atmósfera	13
1.5.1	Aproximación Euleriana	15
1.5.2	Aproximación Lagrangiana	17
1.6	Control de emisiones	19

Capítulo 2

Modelo de dispersión

2.1	Definición de un modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos	21
2.2	Unicidad y estabilidad de la solución en el sentido clásico	25
2.3	Ecuación de balance de masa	29

Capítulo 3

Modelo adjunto de dispersión de contaminantes atmosféricos

3.1	Operador adjunto	32
3.2	Derivación del modelo adjunto de dispersión	35
3.3	Definición del problema de control de emisiones	39
3.4	Principio de dualidad	40
3.5	Análisis de sensibilidad	41

Capítulo 4

Control óptimo

4.1	Formulación del problema de programación lineal en el control de emisiones	44
4.2	Existencia de las soluciones	46
4.3	Dos métodos de solución para el problema de programación lineal	48

Capítulo 5

Esquema de solución numérica y ejemplos

5.1	Esquema de Crack-Nicolson	56
5.2.	Separación de operadores componente por componente	59
5.3.	Separación de operadores en la ecuación de transporte	63
5.4.	Ejemplos del control óptimo de fuentes puntuales	66

Conclusiones	72
---------------------	----

Referencias	73
--------------------	----

Índice de Tablas

Tabla 1.4.1 Resumen de los cuatro contaminantes primarios principales y el particulado atmosférico, así como sus fuentes y efectos de los mismos	8
Tabla 1.4.2. Diámetro en micras de algunos constituyentes del material particulado	10
Tabla 1.4.3 Contribuciones por fuente de los cuatro contaminantes primarios principales, así como del particulado atmosférico	11
Tabla 1.4.4. Normas oficiales mexicanas para los cinco contaminantes principales	12
Tabla 5.1. Soluciones para la estrategia de control óptimo	70

Índice de figuras

Fig.1.4.1 Dispersión de contaminantes en una situación normal y con inversión térmica, así como la estabilidad atmosférica correspondiente para cada caso.	6
Fig. 1.4.2 Resumen de la tabla 1.1.3 de los cuatro contaminantes primarios principales, así como del particulado atmosférico	11
Fig. 1.5.1 Transporte de una pluma por advección y convección.	14
Fig. 2.1.1 Proyección en el plano x-z del modelo conceptual de dispersión.	23
Fig. 4.4.1 Ejemplo de la diferencia geométrica entre el método simplex y el método de punto interior.	54
Fig. 5.1. Isolíneas de la solución del modelo de dispersión $\varphi_1(r, t)$ en el dominio D en $t = 28800 s$	69
Fig. 5.2. Comportamiento temporal de las funciones adjuntas y comportamiento de la tasa original y la tasa de emisión óptima	71

Resumen

En este trabajo se establece y analiza un problema de programación lineal, cuya solución construye la tasa de emisión óptima para cada fuente contaminante que actúa en una región acotada de la atmósfera. Dicha tasa óptima es una acotación de la tasa de emisión original y su diseño considera como criterio central que no se debe rebasar cierta concentración, donde esa concentración puede ser definida por las normas sanitarias para los contaminantes atmosféricos. La función objetivo en el problema de programación lineal considera el costo de disminuir la actividad industrial en cada fuente de emisión.

En la formulación del problema de programación lineal se utiliza un modelo de dispersión, y su correspondiente modelo adjunto, para una región tridimensional con condiciones de frontera mixtas (entrada y salida de flujo). Se prueba que tal modelo satisface una ecuación de balance de masa, además de ser un problema matemáticamente bien planteado. Las funciones adjuntas se utilizan para establecer la dependencia explícita entre las emisiones y la concentración promedio de los contaminantes en zonas específicas dentro de la región de estudio. Tal reformulación permite obtener un problema de programación lineal de fácil interpretación y solución.

Se describe un método eficiente de separación de operadores por componentes que se utiliza para resolver los modelos de dispersión directo y adjunto, mientras que la solución del problema de programación lineal se determina a través del método Simplex o de algún método de Punto Interior. Al final del trabajo se muestra un ejemplo numérico en dos dimensiones donde cuatro fuentes contaminantes, que emiten SO_2 , se controlan para evitar que en una zona se rebase la concentración de $80 \mu g m^{-3}$ durante las últimas cuatro horas.

Uno de los resultados del análisis del método descrito para realizar control de emisiones en fuentes puntuales es que se pueden utilizar otros modelos de dispersión para la formulación del problema de programación lineal. Esto es una consecuencia de interpretar los coeficientes integrales que aparecen en las restricciones de dicho problema como coeficientes de transferencia de los contaminantes. Tal resultado es una de las ventajas que se obtiene al trabajar con el modelo adjunto de dispersión.

Capítulo 1

Introducción

El fenómeno de la contaminación atmosférica, como un caso particular de la contaminación en cualquier medio natural, es el resultado de una enorme población mundial con un estilo de vida que consume una gran cantidad de bienes y servicios. Debido a esta demanda, la cual ha presentado un constante incremento en las últimas décadas, los diferentes agentes de producción de bienes y generadores de servicios transforman enormes volúmenes de materias primas y combustibles fósiles, liberando diversos residuos contaminantes a la atmósfera (Doménech, 1999; Caselli, 1996).

El ambiente tiene mecanismos para diluir y asimilar estos residuos y reintegrarlos a la naturaleza; no obstante, todo tiene un límite y en muchos casos se está peligrosamente cerca de rebasarlo (Doménech, 1999; Caselli, 1996). Durante el último siglo, las diversas actividades antropogénicas han emitido a la atmósfera, en intervalos de tiempo corto, grandes volúmenes de sustancias en zonas reducidas (ciudades, parques industriales, entre otros), de tal forma que los mecanismos de asimilación de la atmósfera, no son suficientes para reciclar el exceso de sustancias en el ambiente. El resultado es la acumulación y permanencia de diferentes contaminantes, los cuales, al interactuar entre si y con el medio, forman otras especies secundarias, que producen diversos daños en los seres humanos y en los ecosistemas (Seinfeld y Pandis, 1998; Bravo et al., 1991; Rodhe et al., 1981). Esta sinergia entre compuestos emitidos se agudiza en las ciudades o en los parques de desarrollo industrial, lugares en los que las emisiones son diversas y los agentes contaminantes se mezclan y reaccionan al difundirse en el aire.

Cada contaminante atmosférico, en función de la concentración con la cual se presente y su toxicidad, produce diversos problemas de salud pública, que van desde molestias en vías respiratorias, hasta un incremento en los decesos entre la población mas vulnerable, es decir, la contaminación es un factor que disminuye la calidad de vida de los seres humanos (Pope y Dockery, 2006; Bell, 2004; Cicero et al., 2001; Kawada, 1984). Desafortunadamente, el impacto de la mezcla de contaminantes no sólo es local, como en el caso del smog fotoquímico ciudadano (Wark y Warner, 1996); también puede ser regional, como los eventos de precipitaciones ácidas (Beilke y Elshout, 1983; Rodhe et al., 1981); o globales, como el fenómeno de destrucción de la capa de ozono; y el cambio climático mundial (Seinfeld y Pandis, 1998).

La sociedad actual no puede regresar a un momento preindustrial para resolver los problemas que ocasiona la contaminación atmosférica, por lo tanto, es fundamental realizar estudios que determinen programas de control de emisiones; estos programas deben implementar medidas para disminuir la concentración de cada sustancia nociva en la atmósfera hasta que ésta se ubique por debajo de las normas sanitarias máximas admisibles ó normas de la calidad del aire (Flagan y Seinfeld, 1998).

1.1 Justificación

Una forma de abordar el estudio de la concentración de los contaminantes en la atmósfera, y posteriormente su control, consiste en la aplicación de modelos matemáticos de dispersión de contaminantes (Panos y Seinfeld, 1986; Seinfeld y Pandis, 1998). La ventaja que proporciona esta herramienta consiste en simular por computadora la concentración de los diversos contaminantes emitidos y generados en una región, y con esto identificar los lugares donde las emisiones tienen un mayor impacto, es decir, permite identificar las fuentes que provocan que en una determinada zona con especial sensibilidad (zonas habitacionales, bosques, etc.) se rebasen las concentraciones máximas admisibles. Con esta información es posible planificar la instalación de nuevas zonas industriales (Marchuck, 1986; Skiba et al., 2005), montar dispositivos de seguridad en regiones de alto riesgo para evitar accidentes o descargas clandestinas (Skiba, 2003) y diseñar estrategias de control de emisiones para las industrias en operación (Parra-Guevara et al., 2010; Cheng et al., 2007; Liu et al., 2007; Parra-Guevara y Skiba, 2006; Parra-Guevara y Skiba, 2003; Cooper et al., 1996; Penenko y Raputa, 1983; Marchuck, 1982).

1.2 Objetivo general

En las últimas décadas, una metodología que ha funcionado para tratar problemas ambientales tales como el control de la contaminación del aire, la remediación de los sistemas acuáticos y la gestión de desechos sólidos, entre otros, consiste en acoplar técnicas de modelación matemática de sistemas y métodos de optimización con el uso de cómputo de alto rendimiento. Tal metodología permite analizar los sistemas ambientales a través de la solución de los modelos matemáticos y computacionales obtenidos (p. ej. mediante la creación de diferentes escenarios para un conjunto de alternativas factibles o calculando soluciones óptimas según algún criterio). De esta forma es posible seleccionar estrategias eficientes para el manejo de dichos problemas.

El objetivo de este trabajo es acoplar técnicas de modelación matemática y numérica para plantear y analizar un problema de programación lineal, cuya solución proporcione las tasas óptimas de emisión para fuentes puntuales contaminantes, es decir, tasas de emisión que aseguren el cumplimiento de las normas de la calidad del aire ó alguna concentración de interés en una zona específica.

1.2.1 Hipótesis

1. La contaminación atmosférica es un fenómeno que disminuye la calidad de vida de los seres humanos y que tiene impactos adversos en los ecosistemas. Por tal motivo, es necesario establecer estrategias de control de emisiones con el fin de que se cumplan un conjunto de normas de la calidad del aire o que se alcancen metas específicas de reducción de las concentraciones en zonas sensibles.
2. La concentración de los contaminantes en una región depende de las tasas de emisión de dichas sustancias y de las condiciones de dispersión en la atmósfera, las cuales se asume que son conocidas. Ya que no se tiene control sobre la dinámica de la atmósfera entonces las únicas variables por controlar son las tasas de emisión que se buscan redefinir con el fin descrito en el punto 1.
3. La modificación de las tasas de emisión tiene un impacto económico en las fuentes industriales por lo que la reducción en las emisiones se debe buscar minimizando la variación o costo de dicha modificación.

1.2.2 Objetivos específicos

1. Definir un modelo de dispersión para fuentes puntuales que emiten contaminantes primarios en una región tridimensional con condiciones de frontera mixtas y relieve en la superficie.
2. Obtener el modelo adjunto de dispersión correspondiente.
3. A partir del modelo de dispersión y su adjunto plantear el problema de programación lineal el cual será resuelto con el método Simplex o con algún método de Punto Interior.
4. Realizar ejemplos sintéticos para observar el desempeño de la estrategia de control de emisiones para las fuentes puntuales.

1.3 Generalidades

El presente trabajo aporta un modelo matemático, basado en un modelo de dispersión y su adjunto, que permite generar una estrategia de control de emisiones para fuentes puntuales. Esta estrategia consiste en el rediseño o acotamiento de las tasas de emisión de las fuentes industriales con el fin de que se cumplan las normas de la calidad del aire ó en general no se rebase una concentración de interés. Ya que estas normas representan concentraciones promedio temporales, la estrategia de control que se sugiere busca reducir la concentración promedio de los contaminantes, en una determinada región y sobre un intervalo de tiempo.

Esta estrategia de control, que permite el cálculo explícito de las tasas de emisión para cada fuente puntual a través de la función adjunta, constituye la aportación original en esta tesis, y se presenta en el Capítulo 4. El Capítulo 3 presenta el concepto fundamental de adjunción, el cual es la base en la construcción del control sugerido. En el Capítulo 5 se presenta un esquema de solución numérica para los modelos de dispersión y su adjunto, así como algunos ejemplos numéricos de la aplicación de la estrategia de control.

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

1.4 Contaminación atmosférica

En forma general, un *contaminante atmosférico* es una sustancia que por fuentes naturales o antropogénicas se emite a la atmósfera en cantidades tales que a corto, mediano o largo plazo, ocasiona efectos negativos en los seres vivos, en los ecosistemas y en los materiales (Caselli, 1996).

Los eventos naturales, como erupciones volcánicas, incendios forestales y procesos de fermentación anaeróbica, pueden producir grandes cantidades de bióxido de azufre (SO_2), bióxido de carbono (CO_2), óxidos de nitrógeno (NO_x), metano (CH_4), ácido clorhídrico (HCl), amoníaco (NH_3), ácido sulfhídrico (H_2S), particulado sólido, etc., sin embargo, dichos eventos son esporádicos (Wark y Warner, 1996).

Así mismo todos los fenómenos meteorológicos pueden jugar un papel importante en la evolución de los contaminantes en la atmósfera. *El viento, la inversión térmica (Fig. 1.4.1) y las precipitaciones* tienen una labor importante en el aumento y disminución de la contaminación.

El viento generalmente favorece la disminución de los contaminantes ya que desplaza y diluye las masas de aire en función de la presión y la temperatura. El efecto que puede causar el viento depende del tipo de terreno o incluso de la configuración de los edificios en las zonas urbanizadas (Seinfeld y Pandis, 1998; Wark y Warner, 1996).

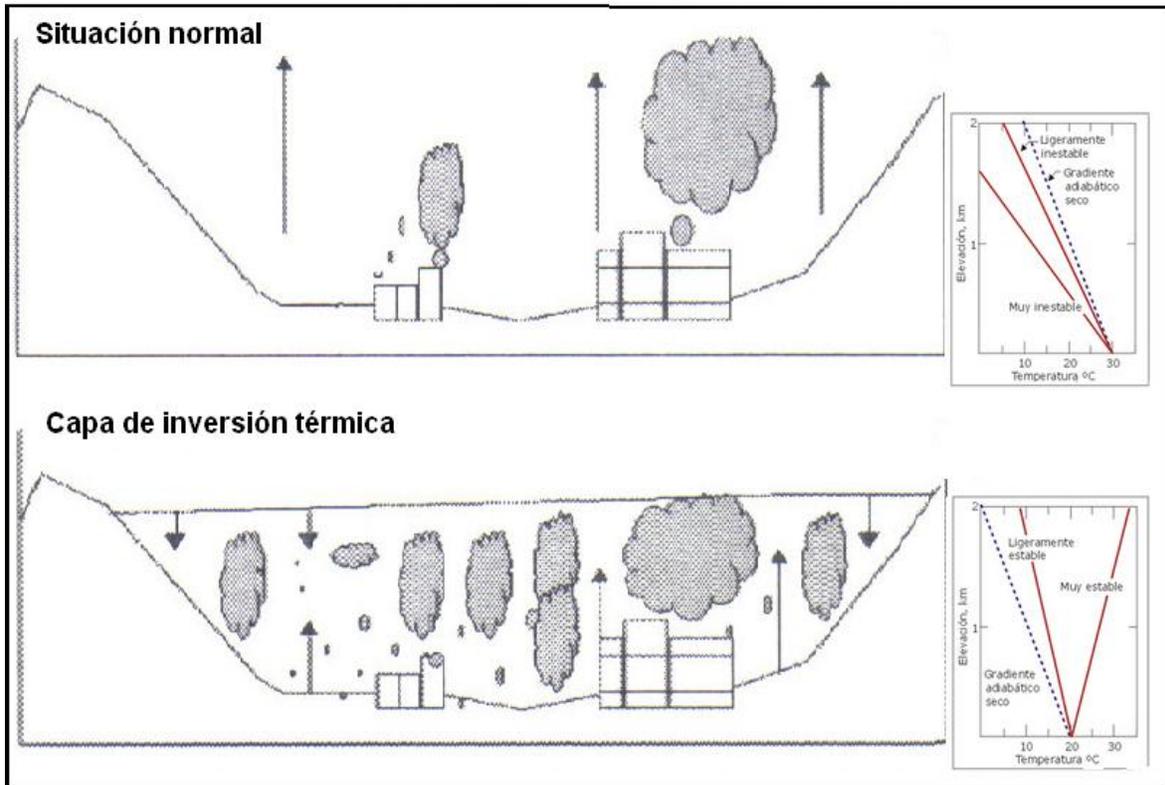


Fig.1.4.1 Dispersión de contaminantes en una situación normal y con inversión térmica, así como la estabilidad atmosférica correspondiente para cada caso.

La inversión térmica. Normalmente la temperatura del aire disminuye con la altura, de tal manera que en la atmósfera se tiene una disminución de 0.64 a 1 °C cada 100 metros en la zona más próxima a la superficie de la tierra, llamada troposfera, por encima de ésta la temperatura disminuye más rápidamente. Este es el gradiente térmico normal (ver Fig. 1.4.1), pero bajo determinadas condiciones orográficas y meteorológicas este gradiente puede alterarse de tal manera que a una determinada altura la temperatura del aire sea superior a la de una altura inferior (Seinfeld y Pandis, 1998; Wark y Warner, 1996).

La presencia de una inversión térmica impide la dispersión vertical de los gases, partículas y aerosoles enviados a la atmósfera por las industrias, calefactores, motores de explosión, actividades urbanas, etc. Las causas que determinan la aparición de una inversión térmica son diversas, pero normalmente son provocadas por uno de los siguientes procesos:

- Por pérdida de radiación de la superficie de la tierra, durante la noche, el aire en contacto con la superficie puede hacerse más frío que las capas cercanas a la superficie dándose una inversión por radiación, además, se caracteriza por viento débil o nulo y en un pequeño espesor. En México este tipo de inversiones son típicas tras el paso de un frente frío, ya que son ocasionadas por el anticiclón que viene detrás del frente frío y que impide la formación de nubes de tipo cumuliforme o estratiforme, que son las que impedirían la pérdida de radiación (Ahrens C. Donald, 2006; Lester, 2007; SARH SMN, 1978; Sediña N. Irene, Pérez M 2006; Whiteman C. David 2000).
- Por subsistencia, este tipo de inversiones se dan a cierta altura del piso y son ocasionadas por el aire descendente de un anticiclón hacia regiones más bajas de la atmósfera, caracterizadas por la separación rápida de la curva de temperatura de punto de rocío y la temperatura ambiente en un radio-sondeo (Ahrens C. Donald, 2006; Lester, 2007; SARH SMN, 1978; Sediña N. Irene, Pérez M 2006; Whiteman C. David 2000).
- En la zona de transición de un frente. En la república mexicana es común encontrarlas cuando el radio-sondeo atraviesa verticalmente al frente frío, recordemos que un frente frío es ocasionado cuando la masa de aire más cálido es obligado a elevarse sobre el aire frío. Este tipo de inversiones se distingue en un radio-sondeo por la alta humedad ocasionada por la condensación del vapor de agua que existe en esa región (Ahrens C. Donald, 2006; Lester, 2007; SARH SMN, 1978; Sediña N. Irene, Pérez M 2006; Whiteman C. David 2000).
- Por advección, este tipo de inversiones se da cuando aire más cálido pasa a través de regiones frías, causando grandes bancos de niebla (Ahrens C. Donald, 2006; Lester, 2007; SARH SMN, 1978; Sediña N. Irene, Pérez M 2006; Whiteman C. David 2000).

Comúnmente es más frecuente la aparición de inversiones térmicas en el borde oriental de los anticiclones, impactando a grandes ciudades como es el caso de Los Angeles, Santiago, Lisboa, El Cabo, que presentan un alto número de inversiones térmicas a lo largo del año, agravado por un alto índice de polución existente en estas macrociudades.

Las precipitaciones en forma de agua o nieve tienen un efecto de limpieza del aire, pero evidentemente los contaminantes pasan a los suelos o a las aguas.

Las actividades antropogénicas, como la agricultura, ganadería, generación de electricidad, transporte, minería, metalurgia, tratamientos de residuos, industria química y electrónica, son las principales generadoras de contaminantes (SO₂, monóxido de carbono (CO), NO_x, CH₄, HCl, NH₃, ácido sulfúrico (H₂SO₄) metales pesados (Pb-plomo, Cd-Cadmio, Zn-Zinc), hidrocarburos, entre otros), tanto por la diversidad de sustancias como por las cantidades emitidas y su frecuencia de emisión (Doménech, 1999; Caselli, 1996).

Al analizar el fenómeno de la contaminación atmosférica en forma regional y a mediano plazo, se concluye que por su valor de emisión son cinco los contaminantes más importantes, al aportar el 95% de las emisiones contaminantes.

Estos contaminantes son:

Tabla 1.4.1 Resumen de los cuatro contaminantes primarios principales y el particulado atmosférico, así como sus fuentes y efectos de los mismos (Doménech, 1999; Caselli, 1996).

Compuesto	Toxicidad	Observaciones
CO Monóxido de carbono	Forma carboxihemoglobina que causa envenenamiento de la sangre.	Es un contaminante típico producido por los medios de transporte. Principal fuente es la combustión incompleta: -Automóviles -Calderas -Centrales térmicas -Explotación minerales de azufre -Fabricación sulfúrico
NO _x Oxido y bióxido de Nitrógeno	Bajo la forma de bióxido causa irritaciones en las vías respiratorias.	Se produce en todas las combustiones a alta temperatura: -Motores de combustión interna -Centrales eléctricas -Fabrica de explosivos -Volcanes y tormentas
SO ₂ Bióxido de Azufre	Aumenta la resistencia al flujo pulmonar.	Se produce en las combustiones de sustancias que contienen azufre: -Automóviles -Calderas
Orgánicos Volátiles	Algunos orgánicos volátiles son cancerígenos, p. ej. el benceno.	En presencia de NO ₂ y ozono, causa esmog fotoquímico.
Particulado	Toxicidad directa causada por algunos componentes (plomo, amianto, etc.)	Sus dimensiones varían entre 0.001 y 10,000 micras.

Las tres primeras son sustancias químicas que poseen una composición definida; los hidrocarburos son una familia de sustancias; y finalmente bajo el nombre de material particulado figuran los aerosoles líquidos o sólidos que se encuentran en suspensión en el aire. Algunas características de estos contaminantes son:

El monóxido de carbono

Cada año se introduce al aire cerca de 200 millones de toneladas de este contaminante más el que se genera en la troposfera a partir del metano. Se forma en todos los procesos de combustión en los que no se halla presente el oxígeno suficiente, o en los que los gases de la combustión no permanecen en contacto con el oxígeno el tiempo que se precisaría para completar la transformación del carbono en CO₂. Por esta razón, la mayor parte del monóxido de carbono se produce en los medios de transporte, que contribuyen con cerca del 70% de la cantidad total emitida. Sin embargo existen otras fuentes que contribuyen notablemente a la producción de monóxido de carbono: los incendios forestales, las quemas agrícolas de maleza, residuos de cosechas y vegetación, actividades industriales: tratamiento químico a la madera (industria papelera); proceso de fraccionamiento o cracking (industria papelera); enriquecimiento del mineral de hierro y producción de acero (Doménech, 1999; Caselli, 1996).

Los óxidos de nitrógeno

Se forman en todos los procesos de combustión en los que la temperatura sea superior al millar de grados centígrados. De los 50 millones de toneladas (aproximadamente) de NO_x que se emiten anualmente en todo el mundo, más del 90% proviene de procesos de combustión que quedan repartidos a partes más o menos iguales entre las combustiones que se efectúan en instalaciones fijas, civiles e industriales, y las que se realizan en el sistema de transporte. Esto se hace evidente, en las zonas donde se reúnen grandes cantidades de habitantes o de industrias, particularmente cuando las condiciones de dispersión son desfavorables, la concentración de óxidos de nitrógeno en el aire se incrementa en forma dramática, con respecto a los valores normales de la atmósfera (Doménech, 1999; Caselli, 1996).

El bióxido de azufre

Los compuestos que contienen azufre están presentes en la atmósfera natural no contaminada. Estas sustancias provienen de la descomposición bacteriana de la materia orgánica, de los gases volcánicos y otras fuentes. Sin embargo, su contribución en el balance total de SO_2 resulta muy pequeña en comparación con las producidas en los centros urbanos e industriales como resultado de las actividades antropogénicas (Doménech, 1999).

Son 130 millones de toneladas de SO_2 las que se arrojan anualmente al aire, aproximadamente el 70% proviene de combustiones o proceso de combustibles que contienen azufre (diesel y combustóleo principalmente) y la fundición de minerales ricos en sulfatos. Se generan principalmente por la industria (incluyendo las termoeléctricas), seguido de los vehículos automotores (Doménech, 1999; Caselli, 1996).

Hidrocarburos

Los hidrocarburos presentes en la atmósfera son de estructura y naturaleza diversa, y tienen su origen tanto en fuentes naturales como antropogénicas. Las fuentes naturales comprenden principalmente los compuestos aromáticos y fragantes generados por la vegetación (en forma de terpenos y otros compuestos isoprenoides, como por ejemplo, el pineno y el limoneno); la materia orgánica en descomposición también es otra fuente importante de hidrocarburos (principalmente el metano CH_4), e inclusive los animales y nosotros mismos también emitimos hidrocarburos a través de los procesos de digestión y sudoración natural. Por lo que se refiere a las emisiones antropogénicas estas son particularmente importantes en las ciudades, en donde se produce la mayor parte de los hidrocarburos más reactivos, y que provienen de actividades industriales relacionadas con la producción de sustancias químicas y solventes, así como las asociadas al consumo de combustibles, ya sea en fuentes móviles o fijas. En conjunto, los hidrocarburos de origen antropogénico que se emiten anualmente en todo el mundo alcanzan el centenar de millones de toneladas (Doménech, 1999; Caselli, 1996; Riveros. et. al. 1994).

El particulado atmosférico

Este contaminante está constituido por gotitas microscópicas de líquidos o diminutas partículas sólidas que también contaminan a la atmósfera. Alrededor de 280 millones de toneladas de partículas (algo más del 10% de la cantidad total que ingresa a la atmósfera en un año) son de origen humano (US EPA, 2008). Por ejemplo, cuando el carbón se quema hay partículas en forma de cenizas pesadas y las partículas más pequeñas son arrastradas por los gases de combustión, vertiéndose al aire.

Puesto que el material particulado no es un gas, su concentración no se puede expresar en ppm; por ello se usa como medida la masa que se encuentra presente en un cierto volumen de aire, generalmente en microgramos (μg) por m^3 . Esta magnitud, que en un aire absolutamente limpio es del orden de menos de 10 microgramos por m^3 , alcanza valores de un centenar de microgramos por m^3 en la mayor parte de las áreas urbanas, y puede llegar a 2 000 o 3 000 microgramos por m^3 durante los episodios de contaminación graves (Doménech, 1999; Caselli, 1996).

Las dimensiones del material particulado son muy variables y pueden ir desde una milésima de micra (0.001) hasta algunos milímetros (10000 micras). Algunos constituyentes del particulado y sus dimensiones (diámetro en micras) son:

Tabla 1.4.2. Diámetro en micras de algunos constituyentes del material particulado (Caselli, 1996).

Humo	0.001	a	0.3
Humo del tabaco	0.01	a	0.2
Aerosol de plomo	0.1	a	5
Pigmentos de barnices	0.1	a	10
Plaguicidas	0.5	a	10
Niebla	1	a	50
Emisiones de las cementeras	1	a	100
Cenizas	1	a	500
Arena resuspendida	1	a	3 000

Examinando globalmente los cinco contaminantes principales se tiene que las contribuciones por fuente son:

Tabla 1.4.3 Contribuciones por fuente de los cuatro contaminantes primarios principales, así como del particulado atmosférico (Caselli, 1996).

Contaminante	Combustiones	Transporte	Industria	Tratamiento de desechos	Otras fuente	Total de Contaminante
CO	0.3	41.62	4.27	2.69	6.89	55.76
SO2	9.88	0.37	2.4	0.04	0.07	12.76
NOx	3.73	4.34	0.07	0.15	0.22	8.53
Hidrocarburos	0.22	7.34	2.1	0.75	2.77	13.17
Mat. Particulado	2.54	0.3	4.94	0.52	1.5	9.81
Emis. Totales de las fuentes	16.67	53.97	13.78	4.15	11.45	100

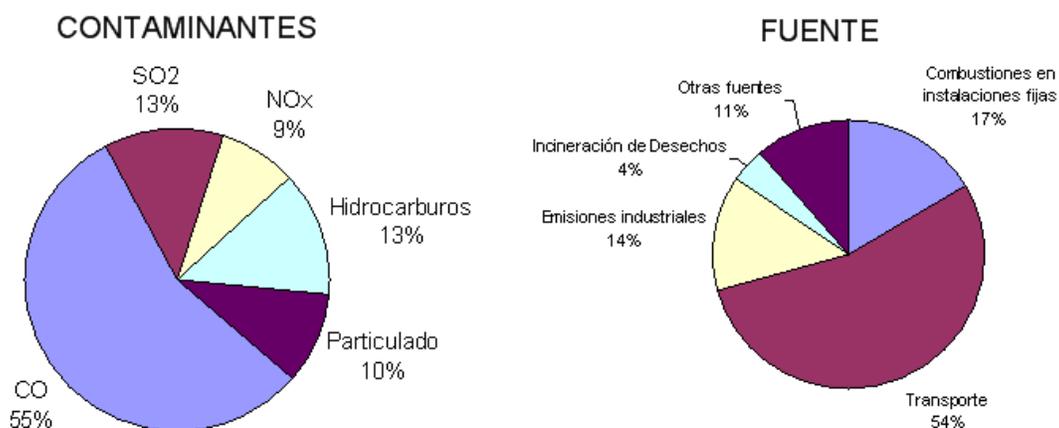


Fig. 1.4.2 Resumen de la tabla 1.1.3 de los cuatro contaminantes primarios principales, así como del particulado atmosférico (Caselli, 1996).

En resumen, el monóxido de carbono, los óxidos de nitrógeno y los hidrocarburos, tienen su origen principalmente por la combustión de gasolinas en automotores, mientras que el bióxido de azufre y material particulado se emiten por fuentes industriales, como termoeléctricas, incineradores y cementeras (Tabla 1.4.3 y fig. 1.4.2).

Con el fin de comparar estas concentraciones y poder definir el grado de la contaminación atmosférica en un determinado momento, se establece para cada sustancia una concentración máxima admisible o norma de calidad del aire, la cual es un promedio que está en función de la toxicidad particular de la sustancia y del tiempo de exposición a ésta. El valor numérico de cada norma de calidad del aire cambia según el intervalo de tiempo considerado y juntas determinan los niveles de polución máxima a los cuales se recomienda que puedan estar sometidas las personas (Doménech, 1999; Caselli, 1996). En la tabla 1.4.4 se muestran algunas de las normas de calidad del aire para los cuatro contaminantes primarios principales y el ozono.

Tabla 1.4.4. Normas oficiales mexicanas para los cinco contaminantes principales (Tomado de: <http://www.sma.df.gob.mx/simat2/informaciontecnica/>).

Compuesto	Norma oficial mexicana	Valores máximos admisibles	Intervalo de tiempo
CO	<u>NOM-021-SSA1-1993</u>	11.0 ppm	Promedio móvil en 8 hrs. una vez al año
NO ₂	<u>NOM-023-SSA1-1993</u>	0.210 ppm	Promedio horario
SO ₂	<u>NOM-022-SSA1-1993</u>	0.130 ppm y 0.030 ppm	Promedio de 24 hrs; promedio anual
Particulado (PST)	<u>NOM-025-SSA1-1993</u>	210 µg/m ³	Promedio de 24 hrs.
Ozono	<u>NOM-020-SSA1-1993</u>	0.11 ppm	Promedio horario

Los efectos nocivos que produce cada contaminante en el ambiente y en particular en los seres humanos, depende de diversos factores (Pope y Dockery, 2006; Bell, 2004; Cicero et al., 2001; Kawada, 1984), como son:

- Toxicidad de las sustancias
- Cantidad y frecuencia de la materia introducida al medio
- Diversidad de compuestos
- Condiciones del medio (estabilidad atmosférica, humedad, grado de acidez, capacidad de oxidación)
- Reactividad

Este último factor es de gran importancia, ya que algunas sustancias (contaminantes primarios) introducidas a la atmósfera tienden, por diversos mecanismos de reacción a generar otras sustancias (contaminantes secundarios) de mayor toxicidad. Ejemplos típicos de contaminantes secundarios son el ozono y el ácido sulfúrico y nítrico; el primero se forma cuando la radiación solar descompone el dióxido de nitrógeno en presencia de hidrocarburos reactivos, los dos últimos se forman cuando el bióxido de azufre y bióxido de nitrógeno reaccionan con los radicales *OH* y el agua. Estas sustancias ácidas pueden tener un impacto lejos de la fuente de origen, ya que las reacciones que las forman pueden desarrollarse durante su transporte. De esta forma, emisiones que tiene lugar en Alemania se perciben como lluvias ácidas en Suecia; es decir, el impacto es regional (Rodhe et al., 1981). En el caso del ozono las reacciones involucradas son rápidas y su impacto es local; esto lo convierte en un elemento del esmog fotoquímico en ciudades como Los Ángeles y la Ciudad de México (Bravo et al., 1991).

La reactividad es un factor que hace que los eventos de contaminación sean fenómenos muy complejos de estudiar y controlar con modelos matemáticos, ya que las reacciones involucradas se representan con ecuaciones que por lo general son no lineales (Seinfeld y Pandis, 1998). Como una aproximación inicial al problema de control, en este trabajo sólo se considera reactividad de primer orden o lineal, ya que en este trabajo sólo se considera al fenómeno de la dispersión.

Por otra parte, es importante destacar que el impacto que tiene los diversos contaminantes en la salud de los seres humanos es aún un tema parcialmente conocido, ya que se entienden los efectos de sustancias en grandes cantidades durante algunas horas, pero en general se desconoce el impacto que producen concentraciones medias o bajas a lo largo de años o décadas (Pope y Dockery, 2006; Caselli, 1996). Por ejemplo, los experimentos que se han realizado con animales demuestran que concentraciones de 2 ppm de ozono durante 3 horas son letales; por otra parte, las concentraciones que se tienen durante los episodios de esmog fotoquímico en las ciudades son de alrededor de 0.1 ppm durante periodos de 4 a 8 horas en un día, lo cual provoca irritaciones en los ojos y ataques de asma, sin embargo, se ignoran las consecuencias de vivir expuesto a este contaminante por años.

Otro ejemplo de este tipo lo constituyen los hidrocarburos polinucleares, como el benzopireno; estas sustancias provienen de la combustión del carbón, el combustóleo y las gasolinas, y se identifican como potentes cancerígenos en altas concentraciones; sin embargo, no se conoce su impacto sobre las personas cuando están presentes en concentraciones de algunos nanogramos por metro cúbico, que es la concentración típica en las grandes ciudades (Caselli, 1996).

Un factor que tiende a complicar el impacto de los contaminantes en los seres vivos, es el hecho de que en el ambiente coexisten cientos de sustancias nocivas a la vez, las cuales pueden provocar un mayor daño en su acción conjunta, que la suma de los impactos de cada sustancia por separado (fenómeno conocido como sinergia). Por ejemplo, el episodio de contaminación atmosférica en diciembre de 1952 en Londres, al cual se le atribuyen 4000 muertes, fue el resultado de la acción sinérgica del bióxido de azufre con material particulado, ambas sustancias formadas por la combustión del carbón en hogares y fábricas (Caselli, 1996; Wark y Warner, 1996).

1.5 Dispersión de los contaminantes en la atmósfera

Todo episodio de contaminación atmosférica está constituido por la fuente de producción de los contaminantes (caracterizada por su tasa de emisión, diámetro de la chimenea, velocidad de salida del gas y la temperatura de los mismos), el medio de transporte y de transformación física y química (atmósfera) y el medio receptor (Wark y Warner, 1996; Flagan y Seinfeld, 1988). Es en el medio de transporte y de transformación donde la mezcla de los contaminantes primarios y secundarios se dispersa generando impactos locales (esmog fotoquímico), regionales (lluvia ácida) ó incluso planetarios (destrucción de la capa de ozono). La dispersión en la atmósfera de los contaminantes que provienen de vertederos y chimeneas (fuentes puntuales) es un fenómeno complejo, ya que depende de varios factores correlacionados, como son: la naturaleza física y química de las sustancias vertidas, las características meteorológicas de la región, la ubicación de las chimeneas con respecto a la dirección del viento, la tasa de emisión de cada fuente puntual, la temperatura y velocidad de salida de los gases, así como el tipo de terreno (plano ó complejo) en la dirección del viento (Wark y Warner, 1996; Flagan y Seinfeld, 1988).

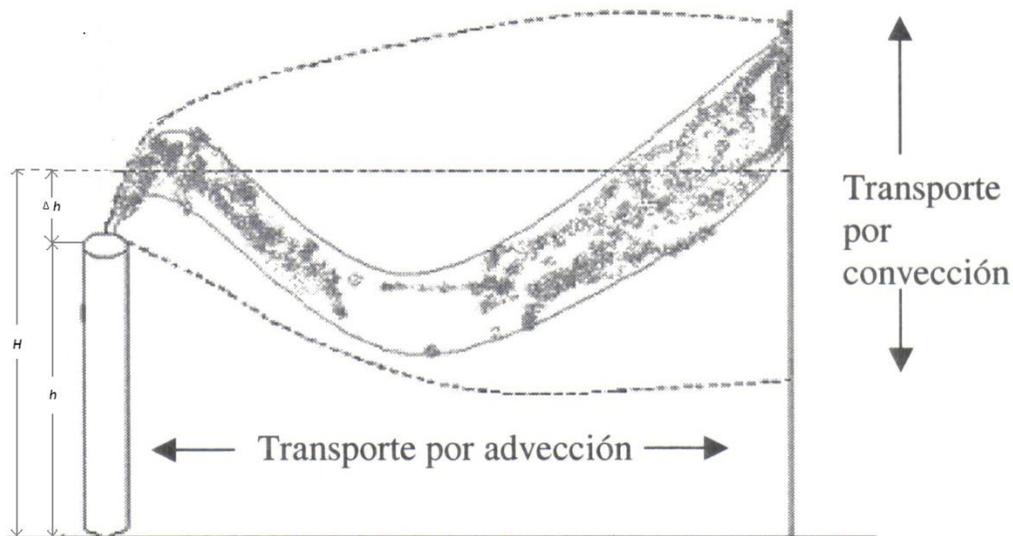


Fig. 1.5.1 Transporte de una pluma por advección y convección.

De la figura 1.5.1, h es la altura de la chimenea, Δh es la altura de los gases debido a la capacidad de flotación y a la velocidad de salida de los mismos y H es la altura efectiva de la chimenea que es igual a $h + \Delta h$.

Por regla general, las emisiones a la atmósfera tienen lugar en la capa de mezcla; esta corresponde a la capa de la atmósfera directamente en contacto con la superficie terrestre y es donde, con mucha frecuencia, tienen lugar turbulencias a causa de la interacción del viento con la rugosidad superficial. Estas turbulencias tienden a dispersar los contaminantes y de esta forma los gases y las partículas pequeñas, de tamaño inferior a $1 \mu g$ (aerosoles), pueden alcanzar mayores altitudes e introducirse en la atmósfera libre. Diversos modelos matemáticos usan la difusión turbulenta como el principal elemento de la dispersión de contaminantes; sin embargo, conforme se incrementa la altura el transporte advectivo se hace más importante (Wark y Warner, 1996; Flagan y Seinfeld, 1988). Por lo tanto, al considerar un contaminante en la atmósfera, se debe tomar en cuenta que éste se dispersa fundamentalmente por: transporte por advección (desplazamiento horizontal de la masa contaminante incorporada al movimiento dominante de la masa del aire), transporte por convección (desplazamiento vertical de la masa contaminante incorporada al movimiento dominante de la masa del aire), difusión molecular (movimiento aleatorio de las moléculas por su agitación térmica) y difusión turbulenta (movimiento aleatorio de la masa contaminante debido a movimientos al azar de la masa de aire), ver Fig. 1.5.1.

Dos factores que limitan la dispersión de los contaminantes en la atmósfera son la lluvia y, en el caso de los aerosoles, su tamaño. Por lo general, si el particulado es de origen natural entonces tarda en depositarse en la superficie terrestre un día, sin embargo, si es de origen antropogénico entonces es de menor tamaño (décimas de μm), y tarda en depositarse más de diez días (Wark y Warner, 1996; Flagan y Seinfeld, 1988).

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

Existen dos aproximaciones matemáticas básicas para describir la dispersión de contaminantes; estas son las aproximaciones *Euleriana* y la aproximación *Lagrangiana* (Seinfeld y Pandis, 1998). Ambas aproximaciones definen modelos probabilísticos, ya que describen las concentraciones como función de variables aleatorias. De estos modelos probabilísticos es posible obtener modelos determinísticos al hacer simplificaciones; es decir, tomar promedios de las variables aleatorias, considerar que las variables aleatorias cumplen ciertas funciones de densidad y de probabilidad, aproximar términos estocásticos en función de valores promedios, idealizar condiciones atmosféricas, las fuentes de emisión y de la reactividad de las sustancias. Es importante destacar que los modelos deterministas derivados de las aproximaciones Euleriana y Lagrangiana simulan concentraciones puntuales promedio de cada especie contaminante. A continuación se describen dichos modelos según Seinfeld y Pandis (1998).

1.5.1 Aproximación Euleriana

Si se considera un diferencial de volumen fijo y se hace un balance de masa para cada especie contaminante en éste, en función de los flujos de masa transportados por el viento, los flujos por difusión molecular, las emisiones y la transformación por reactividad (generación o destrucción), se obtiene las siguientes ecuaciones para $\alpha = 1, \dots, N$,

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

Donde C_{α} es la concentración de la especie α , \mathbf{U} es la velocidad del viento, D es el coeficiente de difusión molecular, R_{α} es la rapidez de la transformación química (la cual depende de la temperatura T y de la radiación) y S_{α} es la fuente de emisión de la especie α .

La velocidad \mathbf{U} es la suma de una componente determinística \bar{U} y una componente estocástica U' (responsable de la difusión turbulenta); por lo tanto la solución C_α de (1.1) es una variable aleatoria. Ya que no es posible medir U' , entonces en la práctica no es posible resolver (1.1) para encontrar C_α . Por esta razón, el siguiente paso en el modelo Euleriano es simplificar para alcanzar un modelo que involucre sólo promedios (modelo determinista). Si se considera la ecuación de continuidad $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$, se promedia en la ecuación (1.1), se desprecia la difusión molecular contra la turbulenta y se cierra el problema de la turbulencia de acuerdo con la K-Teoría:

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

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

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

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

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

- (i) Es posible aplicarlo con variabilidad de condiciones atmosféricas,
- (ii) Las fuentes de emisión pueden ser de área o puntuales y no estacionarias,
- (iii) Incluye reactividad de las especies contaminantes, y
- (iv) Permite conocer la distribución de contaminantes en toda la región donde se aplica, y por lo tanto, indica en qué proporción se deben de acotar las tasas de emisión, si fuera el caso.

Las desventajas en este modelo consisten en lo siguiente:

- (i) Se requiere fijar condiciones de frontera consistentes con el fenómeno, lo cual es un factor que influye en los pronósticos de largo plazo.
- (ii) La solución numérica requiere grandes recursos de cómputo y tiempo de ejecución.
- (iii) Es difícil dar una correcta aproximación numérica al término advectivo el cual está presente en cada una de las ecuaciones del sistema (1.2).

1.5.2 Aproximación Lagrangiana

Si se considera un diferencial de volumen que se mueve con el fluido y se hace en éste un balance de masa, entonces se obtiene el siguiente modelo para la concentración de una especie contaminante.

$$\begin{aligned} \langle C(r, t) \rangle = & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(r, t | r_0, t_0) \langle C(r_0, t_0) \rangle dr_0 + \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^t Q(r, t | r', t') S(r', t') dt' dr' \end{aligned} \quad (1.3)$$

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

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

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

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

con correlación

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

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

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

Otra formulación alternativa a (1.4) que incluye las características de la fuente de emisión y que la superficie no es un sumidero para un contaminante es

$$\langle C(x, y, z) \rangle = \frac{q}{2\pi u \sigma_y \sigma_x} \exp\left\{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right\} \left\{ \exp\left\{-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right\} + \exp\left\{-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right\} \right\} \quad (1.5)$$

Siendo H la altura efectiva de la chimenea (ver fig. 1.5.1). Por otro lado, ambas formulaciones (1.4) y (1.5) son soluciones de (1.3). Las cuales indican que la distancia de masa contaminante en un corte transversal a la dirección del viento \bar{u} , satisface una distribución normal o Gaussiana. Esta conclusión ha sido parcialmente verificada por experimentación de campo para condiciones meteorológicas de turbulencia en tiempos mayores de una hora. La ecuación (1.4) recibe el nombre de *Pluma de Slender* y forma parte de la familia de los modelos de dispersión Gaussiana.

Las ventajas de los modelos de dispersión Gaussiana son:

- (i) Son modelos simples que hacen predicciones en tiempo de cómputo cortos, y
- (ii) Se aplica para N fuentes con superposición.

Las desventajas de estos modelos consisten en lo siguiente:

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

Los primeros esfuerzos para modelar la dispersión de contaminantes atmosféricos fueron aplicados a sustancias poco reactivas en tiempos cortos, como el dióxido de azufre y el material particulado (hollín, metales pesados). Sustancias que ya habían probado su peligrosidad en varias ciudades. Por esta razón, fueron los modelos de dispersión Gaussiana los primeros en aplicarse en la década de los años setenta, resultando útil para algunas aplicaciones prácticas. Es importante destacar que se puede llegar a los modelos de dispersión Gaussiana a través de la formulación Euleriana. Para esto, basta reducir (1.2) en su estado estacionario para una velocidad constante que domina la difusión en esa dirección, sin considerar reactividad y tomando sólo una fuente puntual (*ecuación de Fick*, Wark y Warner, 1996), la solución que se obtiene entonces es (1.4) ó (1.5). Por lo anterior, y debido al avance en los sistemas de cómputo, se usan generalmente para modelar la dispersión de contaminantes los modelos Eulerianos tridimensionales.

1.6 Control de emisiones

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

Si se considera el tiempo de aplicación, estos programas se pueden clasificar en dos categorías: *control a largo plazo* y *control a corto plazo* (Flagan y Seinfeld, 1996). Estos programas de control son complementarios y difieren por sus objetivos específicos y por las estrategias que aplican para alcanzar sus metas.

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

- a) Sustitución parcial o definitiva de algunos combustibles,
- b) Introducción de nuevas tecnologías de producción y de limpieza (filtros o catalizadores),
- c) Cierre o reubicación de plantas industriales en una región,
- d) Programas para la disminución del uso de automóviles, etc.

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

$$C = C_e + C_s ,$$

Donde C_e es el costo de implementar las acciones de control y C_s es el costo por los daños en la salud de la población y al ecosistema. Además, este proceso de minimización esta sujeto a que el número de días al año en que se violan las normas de la calidad del aire (C_α^0) este acotado, es decir,

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

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

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

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

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

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

Queda establecido entonces que, tanto en las políticas de control a largo plazo como en las de control de corto plazo, es de gran importancia tener un conocimiento cuantitativo de la reducción necesaria en las tasas de emisión para evitar alcanzar niveles donde los contaminantes dañen a la población. Actualmente este conocimiento preventivo no se ha incorporado completamente a los programas para abatir la contaminación atmosférica de la Ciudad de México y sólo se toman acciones hasta que la concentración de los diferentes contaminantes han alcanzado niveles peligrosos (GDF SMA, 2006).

Capítulo 2

Modelo de dispersión

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

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

2.1 Definición de un modelo de dispersión de contaminantes atmosféricos

Una sustancia contaminante en la atmósfera se encuentra sujeta a diversos procesos físicos y químicos que influyen en su propagación, algunos de éstos son: transporte por advección, sedimentación, difusión turbulenta y transformación por reacciones químicas, por lo que la dispersión de estas sustancias emitidas a la atmósfera por fuentes fijas o móviles es un fenómeno tridimensional y no-estacionario. A continuación se formula un modelo lineal que toma en cuenta estos fenómenos y se supone que el viento responsable del proceso advectivo es conocido.

Sea $\mathbf{D} = D \times (0, H)$ un dominio acotado tridimensional (conexo y simplemente conexo) con frontera abierta $\partial\mathbf{D} = S_0 \cup S \cup S_H$, la cual es la unión de la superficie lateral cilíndrica S , la base S_0 en el fondo y la cubierta S_H en $z = H$ (ver Fig. 2.1.1). Se denota por $r_i = x_i, y_i, z_i \in D$, $i = 1, \dots, N$, los puntos donde se ubican las N fuentes puntuales (fuentes industriales) que emiten K especies contaminantes primarios con tasas respectivas $q_i(t)$, $i = 1, \dots, N$. Se denotan con $\phi_k(r, t)$ a la concentración del k -ésimo contaminante dentro de la región \mathbf{D} en el punto r al tiempo t .

Es importante destacar que se supone que la región de estudio \mathbf{D} contiene a todas las fuentes puntuales de emisión del contaminante, y por lo tanto, no habrá contribuciones externas a la polución dentro de \mathbf{D} . Tomando en cuenta esto en el balance de masa, la propagación de los contaminantes se puede describir a través del siguiente sistema de ecuaciones (ver Fig. 2.1.1):

$$\frac{\partial \phi_k}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi_k + \nabla \cdot \vec{\phi}_k^s - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi_k) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} \right) + \sigma_k \phi_k = f_k(r, t) \text{ en } D \times (0, T) \quad (2.1)$$

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

$$\vec{\phi}_k^s = -v_k^s \phi_k \vec{e}_3 \text{ en } \mathbf{D} \quad (2.3)$$

$$\mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} - U_n \phi_k = -v_k^s \phi_k \text{ en } S_H^- \quad (2.4)$$

$$\mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} = -v_k^s \phi_k \text{ en } S_H^+ \quad (2.5)$$

$$\mu \nabla \phi_k \cdot \vec{n} - U_n \phi_k = 0 \text{ en } S^- \quad (2.6)$$

$$\mu \nabla \phi_k \cdot \vec{n} = 0 \text{ en } S^+ \quad (2.7)$$

$$\hat{\mu} \nabla \phi_k \cdot \vec{n} = 0 \text{ en } S_0 \quad (2.8)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \text{ en } \mathbf{D} \quad (2.9)$$

Donde $\mathbf{U}(r, t) = u, v, w$ denota la velocidad del viento en \mathbf{D} y se supone que cumple la ecuación de continuidad (2.9). $\sigma_k = \sigma_k(r, t) \geq 0$ es el coeficiente de transformación química de la k -ésima especie contaminante. $\mu = \mu(r, t) > 0$ y $\hat{\mu} = \hat{\mu}(r, t) > 0$ son los tensores de difusión turbulenta,

$$\mu = \begin{pmatrix} \mu_x(r, t) & 0 \\ 0 & \mu_y(r, t) \end{pmatrix}, \hat{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_x(r, t) & 0 & 0 \\ 0 & \mu_y(r, t) & 0 \\ 0 & 0 & \mu_z(r, t) \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

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

$$f_k(r, t) = \sum_{i=1}^N q_{ik}(t) \delta(r - r_i) \quad (2.11)$$

donde $\delta(r - r_i)$ es la función delta de Dirac centrada en la posición de la i -ésima fuente puntual que incluye implícitamente a la altura efectiva de la fuente, el diámetro de la chimenea, así como la temperatura y velocidad de salida de los gases. Hay que notar que la emisión total de cada fuente es la suma de las tasas para cada contaminante

$$q_i(t) = \sum_{k=1}^K q_{ik}(t) \quad (2.12)$$

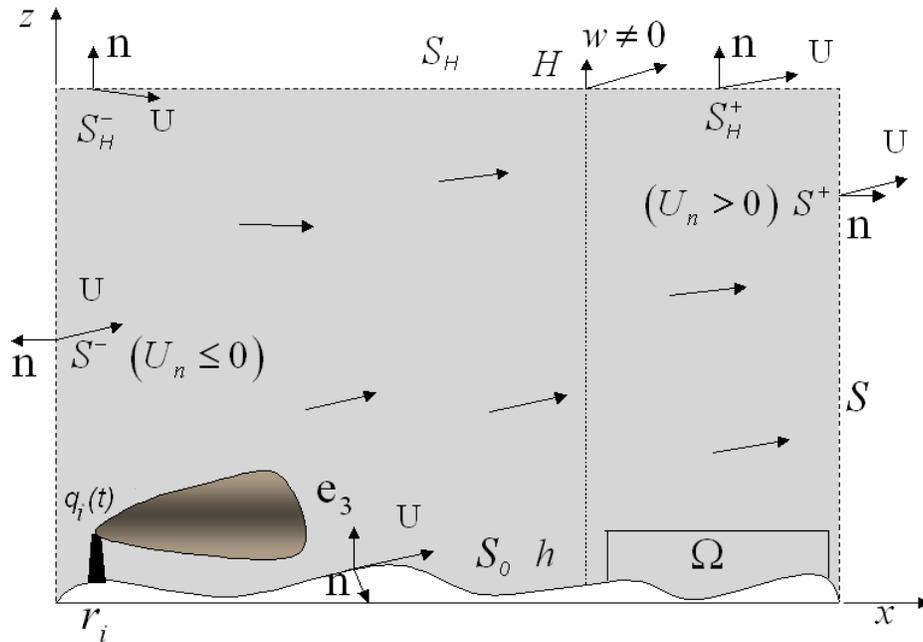


Fig. 2.1.1 Proyección en el plano x-z del modelo conceptual de dispersión.

La ecuación (2.2) define a ϕ_k^0 como la distribución espacial de la k -ésima especie contaminante al tiempo $t=0$ sobre \mathbf{D} , es decir, ϕ_k^0 es el residuo del k -ésimo contaminante en la atmósfera que dejó la actividad industrial en un intervalo de tiempo pasado (por ejemplo durante el día anterior).

El término $\nabla \cdot \vec{\phi}_k^s$ en (2.1), describe el cambio en la concentración de las partículas por unidad de tiempo debido a la sedimentación, la cual está caracterizada por la velocidad constante de sedimentación $v_k^s > 0$.

La frontera S se ha dividido en cinco partes, dos para el flujo horizontal, es decir, S^+ se define como los puntos de S tal que $U_n = \mathbf{U} \cdot \vec{n} > 0$, donde \vec{n} es el vector normal exterior y S^- se define como el complemento ($U_n = \mathbf{U} \cdot \vec{n} \leq 0$). Dos para la frontera superior: S_H^- es la frontera donde la sedimentación es el resultado de la difusión menos la advección (Eq., 2.4), y S_H^+ implica que la sedimentación es igual a la difusión (Eq., 2.5). Por último, en S_0 , que es la frontera inferior, se tiene que la difusión es cero debido a que el flujo es tangente a la superficie irregular (Eq. 2.8). La condición de frontera (2.6) establece que cuando el viento ingresa a la región \mathbf{D} el flujo total del contaminante, tomando en cuenta difusión y advección, es igual a cero, por lo cual, en S^- no hay salida o entrada de la especie contaminante. La condición de frontera (2.7) establece que cuando el viento sale de la región \mathbf{D} se desprecia el flujo difusivo turbulento en comparación con el flujo advectivo del contaminante, por lo tanto, la salida de la especie contaminante sólo es por advección. Estas condiciones de frontera fueron definidas por Marchuk (1982, 1986), y generalizadas al caso de tres dimensiones por Skiba (1993, 1997).

Para concluir la definición del modelo de (2.1)-(2.9) es necesario aclarar el uso de la ecuación de continuidad (2.9) que cierra dicho modelo de dispersión, la cual es una condición de incompresibilidad.

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

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

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

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

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

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

Si se considera la ecuación de Bernoulli

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

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

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

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

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

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

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

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

2.2 Unicidad y estabilidad de la solución en el sentido clásico

Las condiciones de frontera (2.4) a (2.8) no sólo tienen un adecuado sentido físico, sino también poseen buenas características matemáticas, ya que hacen del modelo de dispersión (2.1) - (2.9) un problema bien formulado en el sentido de Hadamard (1923), es decir, la solución del problema (2.1) - (2.9) es única y es estable respecto de pequeñas perturbaciones en las condiciones iniciales, más aún, es posible mostrar que hay estabilidad respecto de pequeñas perturbaciones en el forzamiento (Skiba y Parra-Guevara, 2000).

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

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + A\phi = f \quad (2.13)$$

$$\phi(0) = \phi^0 \quad (2.14)$$

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

Multiplicando la ecuación (2.13) por ϕ y agrupando términos se tiene

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

donde los paréntesis denotan el producto interior definido en H .

Considerando que A es positivo semidefinido, y usando la desigualdad de Schwarz (Skiba, 2005), es posible escribir

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

Si se observa que

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

entonces se obtiene la siguiente desigualdad:

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

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

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

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

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

Dado que A es un operador lineal, la última desigualdad afirma que pequeñas variaciones en f y ϕ^0 inducen pequeñas variaciones en la solución ϕ del problema de evolución, esto es estabilidad. El mismo razonamiento garantiza unicidad, es decir, si se consideran dos soluciones del problema (2.13) - (2.14), entonces, al restar las ecuaciones se tiene un problema de evolución con $\phi^0 = 0$ y $f = 0$, de esto se sigue, según la desigualdad anterior, que la norma de la diferencia de dichas funciones es cero.

Con este resultado general lo único que falta probar para que el modelo (2.1) - (2.9) este bien formulado es que el operador diferencial lineal

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

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

$$(A\phi, \phi) = \int_{\mathbf{D}} \phi \mathbf{U} \cdot \nabla \phi dr + \int_{\mathbf{D}} \phi \nabla \cdot \vec{\phi}^s dr - \int_{\mathbf{D}} \phi \nabla \cdot \mu \nabla \phi dr - \int_{\mathbf{D}} \phi \frac{\partial}{\partial z} \mu_z \frac{\partial \phi}{\partial z} dr + \int_{\mathbf{D}} \sigma \phi^2 dr \quad (2.15)$$

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

$$\int_{\mathbf{D}} \phi \mathbf{U} \cdot \nabla \phi dr = \frac{1}{2} \int_{\partial \mathbf{D}} \phi^2 \mathbf{U} \cdot \vec{n} dS = \frac{1}{2} \left[\int_{S^+ \cup S_H^+} U_n \phi^2 dS + \int_{S^- \cup S_H^-} U_n \phi^2 dS \right] \quad (2.16)$$

Como $\phi \nabla \cdot \vec{\phi}^s = -\frac{1}{2} \nabla \cdot (v^s \phi^2 \vec{e}_3)$, integrado y utilizando el teorema de la divergencia, tenemos

$$\int_{\mathbf{D}} \phi \nabla \cdot \vec{\phi}^s dr = -\frac{1}{2} \int_{\partial \mathbf{D}} v^s \phi^2 \left| \vec{e}_3 \cdot \vec{n} \right| dS = \frac{1}{2} \int_{S_0} v^s \phi^2 \left| \vec{e}_3 \cdot \vec{n} \right| dS \quad (2.17)$$

Para la parte vertical de la difusión turbulenta se emplea $\frac{\partial}{\partial z}(\phi\mu_z \frac{\partial\phi}{\partial z}) = \left| \mu_z^{\frac{1}{2}} \frac{\partial\phi}{\partial z} \right|^2 + \phi \frac{\partial}{\partial z}(\mu_z \frac{\partial\phi}{\partial z})$ y las condiciones de frontera (2.4) y (2.5), posteriormente, integramos en la región \mathbf{D} como se muestra a continuación.

$$-\int_{\mathbf{D}} \phi \frac{\partial}{\partial z}(\mu_z \frac{\partial\phi}{\partial z}) dr = \int_{\mathbf{D}} \left| \mu_z^{\frac{1}{2}} \frac{\partial\phi}{\partial z} \right|^2 dr - \int_{\partial\mathbf{D}} \phi \mu_z \frac{\partial\phi}{\partial z} dS = \int_{\mathbf{D}} \left| \mu_z^{\frac{1}{2}} \frac{\partial\phi}{\partial z} \right|^2 dr + \int_{S_H} v^s \phi^2 dS - \int_{S_H} U_n \phi^2 dS \quad (2.18)$$

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

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

si la última integral se separa en S^+ y S^- , y se aplican las condiciones de frontera (2.6) y (2.7), finalmente se tiene que

$$-\int_{\mathbf{D}} \phi\nabla \cdot (\mu\nabla\phi) dr = \int_{\mathbf{D}} \left| \mu^{\frac{1}{2}} \nabla\phi \right|^2 dr - \int_{S^-} \phi^2 U_n dS \quad (2.19)$$

Si se sustituye en (2.15) las formulas integrales (2.16) a (2.19), y se reordenan los términos, tenemos

$$(A\phi, \phi) = \int_{\mathbf{D}} \left\| \hat{\mu}^{\frac{1}{2}} \nabla\phi \right\|_2^2 dr + \int_{\mathbf{D}} [\sigma\phi^2] dr + \frac{1}{2} \int_{S_0} v^s \phi^2 \left| \vec{e}_3 \cdot \vec{n} \right| dS + \int_{S_H} v^s \phi^2 dS + \frac{1}{2} \left\{ \int_{S^+ \cup S_H^+} U_n \phi^2 dS - \int_{S^- \cup S_H^-} U_n \phi^2 dS \right\} \geq 0, \quad \phi \in \Phi \quad (2.20)$$

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

Otra ventaja de que el operador diferencial lineal en el modelo (2.1) -(2.9) sea positivo semidefinido es que algunos de los esquemas de discretización numérica, basados en diferencias finitas, preservan esta propiedad, y por lo tanto, es fácil establecer la existencia, unicidad y estabilidad de la solución en el problema de dispersión discreto. Además, es posible usar métodos de separación de operadores por componentes, y por lo tanto, trasladar el problema de tres dimensiones a tres problemas simples en una dimensión, lo cual siempre representa una ventaja computacional ya que ahorra memoria y tiempo de cómputo.

2.3 Ecuación de balance de masa

Las condiciones de frontera (2.4) a (2.8) son fundamentales para establecer que el modelo de dispersión este bien formulado, de hecho, es posible aplicar éstas para mostrar que el modelo satisface una ecuación de balance de masa consistente con el fenómeno de estudio. Para llegar a esta ecuación se integra (2.1) sobre el dominio \mathbf{D} ,

$$\int_{\mathbf{D}} \left(\frac{\partial \phi_k}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi_k + \nabla \cdot \vec{\phi}_k^s - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi_k) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} \right) + \sigma_k \phi_k \right) dr = \int_{\mathbf{D}} f_k(r, t) dr \quad (2.21)$$

Si consideramos que $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$ se tiene la igualdad $\nabla \cdot (\phi_k \mathbf{U}) = \mathbf{U} \cdot \nabla \phi_k$. Si se aplica ésta al segundo término (junto con el teorema de la divergencia) se tiene que

$$\int_{\mathbf{D}} \mathbf{U} \cdot \nabla \phi_k dr = \int_{\partial \mathbf{D}} \phi_k \mathbf{U} \cdot \vec{n} dS = \int_{S^+} \phi_k U_n dS + \int_{S^-} \phi_k U_n dS \quad (2.22)$$

Aplicando el teorema de la divergencia en el tercer término tenemos

$$\int_{\mathbf{D}} \nabla \cdot \vec{\phi}_k^s dr = - \int_{\partial \mathbf{D}} v_k^s \phi_k \left| \vec{e}_3 \cdot \vec{n} \right| dS = \int_{S_0} v_k^s \phi_k \left| \vec{e}_3 \cdot \vec{n} \right| dS - \int_{S_H} v_k^s \phi_k dS \quad (2.23)$$

Si se aplica el teorema de la divergencia a la cuarta integral y se usa la condición de frontera (2.6) y (2.7) se escribe

$$\int_{\mathbf{D}} \nabla \cdot (\mu \nabla \phi_k) dr = \int_{S^-} \mu \frac{\partial \phi_k}{\partial n} dS = \int_{S^-} U_n \phi_k dS \quad (2.24)$$

Integrando el quinto término en la región \mathbf{D} se tiene:

$$\int_{\mathbf{D}} \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} \right) dr = \int_{\partial \mathbf{D}} \mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} dS = \int_{S_H^+} U_n \phi_k dS - \int_{S_H} v_k^s \phi_k dS \quad (2.25)$$

Al sustituir (2.22)-(2.25) en la ecuación (2.21) se obtiene que

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbf{D}} \phi_k dr = \sum_{i=1}^N q_{ik}(t) - \int_{\mathbf{D}} \sigma_k \phi_k dr - \int_{S_0} v_k^s \phi_k \left| \vec{e}_3 \cdot \vec{n} \right| dS - \int_{S^+ \cup S_H^+} \phi_k U_n dS \quad (2.26)$$

A la ecuación (2.21) se le aplico la propiedad integral de la función delta de Dirac:

$$\int_{\mathbf{D}} f(r) \delta(r - r_0) dr = f(r_0)$$

La ecuación (2.26) es la ecuación de balance de masa. Esta ecuación indica que la variación de la masa total de la k -ésima especie contaminante en el dominio \mathbf{D} , es igual a la suma de las tasas con que se suministra, menos la tasa de destrucción total por reactividad química, menos lo que sedimenta en la frontera S_0 menos la pérdida de masa contaminante que escapa por la frontera debido a la advección (notar que $U_n \geq 0$ en $S^+ \cup S_H^+$), lo cual es consistente con el fenómeno de dispersión y transformación.

Esta ecuación y (2.20) determinan que cuando $q_i(t) = 0 \quad \forall i$, entonces $\int_{\mathbf{D}} \phi_k dr$ y $\int_{\mathbf{D}} \phi_k^2 dr$ decrecen con el tiempo (notar que $U_n < 0$ en S^-). Además, si $\mu = 0$, $\sigma_k = 0$, $v_k^s = 0$ y $U_n = 0$ sobre la frontera $\partial\mathbf{D}$, entonces ambas integrales se conservan en el tiempo, es decir,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbf{D}} \phi_k dr = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbf{D}} \phi_k^2 dr = 0$$

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

Capítulo 3

Modelo adjunto de dispersión de contaminantes atmosféricos

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

En general, las estimaciones directa y adjunta son elementos complementarios que permiten comprender los diferentes aspectos del modelo ambiental y dar solución a los problemas de reubicación (Marchuck, 1986 y 1995) y control de emisiones industriales (Parra-Guevara et al., 2010; Liu, 2007; Parra-Guevara y Skiba, 2003).

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

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

3.1 Operador adjunto

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

$$Ax, y = x, A'y$$

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

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

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

$$L\phi, g = \phi, L^*g \quad \forall \phi \in \Phi \text{ y } \forall g \in \Phi^* \tag{3.1}$$

Existencia del operador adjunto

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

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

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

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

$$L\phi, g = \phi, v$$

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

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

es decir, L^* es el operador adjunto.

Unicidad del operador adjunto

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

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

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

es decir,

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

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

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

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

Con este último resultado se concluye que $F^*g - L^*g = 0$, es decir, F^* es solo 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. Solo en algunos casos particulares, como el operador de Laplace con condiciones Dirichlet o Neumann homogéneas, se tiene que $L=L^*$ ($\Phi=\Phi^*$), en tales casos el operador L se denomina *autoadjunto*. El caso $L\neq L^*$ pero ($\Phi=\Phi^*$) es importante, ya que se transmiten propiedades cuando alguno de los dos operadores satisface una característica, por ejemplo, si L es definitivo positivo, entonces

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

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

1. Si $A \in M_{n \times n}(R)$, entonces el operador adjunto es la matriz transpuesta A' , y en este caso, autoadjunto significa que A es simétrica ($A=A'$).

2. Si $L\phi=k\phi$ con $\Phi=L_2(0,1)$, entonces $L^*\phi=k\phi$ con $\Phi^*=\Phi$, ya que

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

y por lo tanto L es autoadjunto.

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

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

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

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

$L^*g=-u \frac{d^2g}{dx^2}$ con $\Phi^*=\Phi$, ya que

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

y por lo tanto L es autoadjunto.

3.2 Derivación del modelo adjunto de dispersión

En esta sección se establece un modelo diferencial adjunto asociado al modelo de dispersión (2.1)-(2.9) para una sustancia contaminante en la atmósfera. Este modelo resulta ser la herramienta ideal para hacer el análisis de la sensibilidad lineal del valor promedio de la concentración de dicha sustancia en una región de importancia Ω contenida en \mathbf{D} .

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

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

Donde $|\Omega|$ representa el volumen de la región de interés.

Este funcional tiene unidades de $\mathbf{J}_{\Omega, \tau}$

$$\mathbf{J}_{\Omega, \tau} : \frac{1}{L^3 T} \left(\frac{M}{L^3} \right) L^3 T = \frac{M}{L^3}$$

Donde M es la masa, L^3 es el volumen y T el tiempo.

Se debe notar que es posible hacer un análisis de sensibilidad de $\mathbf{J}_{\Omega, \tau}$ aplicando únicamente el modelo de dispersión (2.1)- (2.9). Para esto, es necesario considerar la solución de (2.1)- (2.9) en un estado básico de los parámetros del modelo y posteriormente calcular la solución con las correspondientes perturbaciones de estos. De esta forma, la anomalía $\delta \mathbf{J}_{\Omega, \tau}$ es la diferencia de la concentración promedio para cada solución. Este enfoque representa una alternativa al estudio del problema de control de emisiones, ya que al perturbar las tasas de emisión, por prueba y error, se podría determinar que tanto hay que reducir dichas tasas para que la concentración promedio cumpla la norma sanitaria. Sin embargo, esto representa un gran trabajo computacional, ya que cada que se perturba un parámetro en el modelo (2.1)- (2.9), este se tiene que resolver para calcular ϕ y estimar $\mathbf{J}_{\Omega, \tau}$. Un enfoque de este tipo no es seguro en el sentido de que siempre se hallará una solución al problema de control, además, se consume una gran cantidad de tiempo de cómputo, lo cual no sirve en el control de corto plazo. El modelo adjunto y el principio de dualidad que origina, representa una gran ventaja sobre este tipo de enfoque.

Modelo adjunto

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

$$H = L_2 \mathbf{D} \times [0, T], \quad L\phi = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi + \nabla \cdot \vec{\phi}^s - \nabla \cdot \mu \nabla \phi - \frac{\partial}{\partial z} \mu_z \frac{\partial \phi}{\partial z} + \sigma \phi \quad y$$

$$\Phi = \phi \in C^2 \mathbf{D} \times [0, T]; \quad \phi(r, 0) = 0, \quad (2.6) \text{ y } (2.7)$$

donde (2.6) y (2.7) significa que ϕ cumple las condiciones de frontera respectivas del modelo (2.1)-(2.9).

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

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

donde el producto interior de H está definido por: $(\phi, \psi) = \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \phi \psi \, dr dt$. Se tiene entonces que

$$\begin{aligned} L\phi, g &= \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g \frac{\partial \phi}{\partial t} \, dr dt + \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g \mathbf{U} \cdot \nabla \phi \, dr dt + \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g \nabla \cdot \vec{\phi}^s \, dr dt - \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g \nabla \cdot \mu \nabla \phi \, dr dt \\ &- \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g \frac{\partial}{\partial z} \mu_z \frac{\partial \phi}{\partial z} \, dr dt + \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g \sigma \phi \, dr dt - \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g f(r, t) \, dr dt \end{aligned}$$

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

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

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

Si se considera (2.9) y el teorema de la divergencia, se deduce que

$$\int_0^T \int_{\mathbf{D}} g \mathbf{U} \cdot \nabla \phi \, dr dt = \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \nabla \cdot (g \mathbf{U} \phi) - \phi \nabla \cdot g \mathbf{U} \, dr dt = \int_0^T \int_{S^+} g \phi U_n \, dS dt + \int_0^T \int_{S^-} g \phi U_n \, dS dt - \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \phi \mathbf{U} \cdot \nabla g \, dr dt$$

Para la tercera integral, si consideramos el teorema de la divergencia tenemos:

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \mathbf{g} \nabla \cdot \vec{\phi}^s \, dr dt &= \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \left[\nabla \cdot (-v^s \phi g \vec{e}_3) - \phi \nabla \cdot (-v^s g \vec{e}_3) \right] dr dt \\ &= \int_0^T \int_{S_H^-} \mathbf{g} \vec{\phi}^s \cdot \vec{n} ds dt + \int_0^T \int_{S_H^+} \mathbf{g} \vec{\phi}^s \cdot \vec{n} ds dt - \int_0^T \int_{S_H^-} \phi \vec{g} \cdot \vec{n} ds dt - \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \phi \nabla \cdot \vec{g} \, dr dt \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \mathbf{g} \nabla \cdot (\mu \nabla \phi) dr dt &= \int_0^T \int_{S^-} \mu g \frac{\partial \phi}{\partial n} dS dt - \int_0^T \int_{S^+} \mu \phi \frac{\partial g}{\partial n} dS dt \\ &- \int_0^T \int_{S^-} \mu \phi \frac{\partial g}{\partial n} dS dt + \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \phi \nabla \cdot (\mu \nabla g) dr dt \end{aligned}$$

Por último, la quinta integral puede expresarse como

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \mathbf{g} \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) dr dt &= \int_0^T \int_{S_H^-} \mu_z g \frac{\partial \phi}{\partial z} dS dt + \int_0^T \int_{S_H^-} \mu_z g \frac{\partial \phi}{\partial z} dS dt - \int_0^T \int_{S_H^-} \mu_z \phi \frac{\partial g}{\partial z} dS dt \\ &- \int_0^T \int_{S_H^-} \mu_z \phi \frac{\partial g}{\partial z} dS dt + \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \phi \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} \right) dr dt \end{aligned}$$

Al definir $\mu \frac{\partial g}{\partial n} = 0$ en S^- , $\mu \frac{\partial g}{\partial n} + U_n g = 0$ en S^+ , $\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} = 0$ en S_H^- , $\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} + U_n g = 0$ en S_H^+ , $\mu \frac{\partial g}{\partial n} + \vec{g} \cdot \vec{n} = 0$ en S_0 , $\vec{g} = -v^s g \vec{e}_3$ en \mathbf{D} y

$$\int_0^T \int_{\mathbf{D}} \phi p(r,t) dr dt = \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g f(r,t) dr dt + \int_{\mathbf{D}} g(r,0) \phi(r,0) dr$$

se obtiene, sumando las cinco últimas ecuaciones, que

$$L\phi, g = \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \phi \left[-\frac{\partial g}{\partial t} - U \cdot \nabla g - \nabla \cdot \vec{g} - \nabla \cdot (\mu \nabla g) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} \right) + \sigma g - p(r,t) \right] dr dt = \phi, L^* g$$

es decir,

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

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

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

$$\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} + U_n g = 0 \text{ en } S_H^+, \quad \mu \frac{\partial g}{\partial n} + \vec{g}^s \cdot \vec{n} = 0 \text{ en } S_0, \quad \vec{g}^s = -v^s g \vec{e}_3 \text{ en } \mathbf{D}$$

Por tanto, podemos establecer que el modelo adjunto con un forzamiento $p(r, t)$ es,

$$-\frac{\partial g}{\partial t} - \mathbf{U} \cdot \nabla g - \nabla \cdot \vec{g}^s - \nabla \cdot (\mu \nabla g) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} \right) + \sigma g = p(r, t) \quad (3.2)$$

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

$$\vec{g}^s = -v^s g \vec{e}_3 \text{ en } \mathbf{D} \quad (3.4)$$

$$\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} = 0 \text{ en } S_H^- \quad (3.5)$$

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

$$\mu_z \frac{\partial g}{\partial z} + U_n g = 0 \text{ en } S_H^+ \quad (3.7)$$

$$\mu \nabla g \cdot \vec{n} + U_n g = 0 \text{ en } S^+ \quad (3.8)$$

$$\hat{\mu} \nabla g \cdot \vec{n} + \vec{g}^s \cdot \vec{n} = 0 \text{ en } S_0 \quad (3.9)$$

donde el forzamiento se define por

$$p(r, t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau |\Omega|}, & r \in \Omega \text{ y } t \in (T - \tau, T) \\ 0, & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (3.10)$$

El modelo diferencial (3.2)-(3.9) es un problema de valores finales. Este problema está bien formulado en el sentido de Hadamard si se resuelve de $t=T$ a $t=0$. Más aun, ya que al reformular las ecuaciones con el cambio de variable: $t' = T - t$ y $U' = -U$, se tiene que el modelo (3.2)-(3.9) tiene la misma estructura que el modelo de valor inicial (2.1)-(2.9), entonces, es posible probar la existencia, la unicidad y la estabilidad de la solución del modelo adjunto exactamente como en la sección 2.2 (Skiba y Parra-Guevara, 2000).

3.3 Definición del problema de control de emisiones

El modelo de dispersión para varias especies contaminantes (2.1) - (2.9) es una herramienta que permite predecir la concentración ϕ_k de la k -ésima sustancia, en cada punto de la región de estudio \mathbf{D} y para cada tiempo $t > 0$, a través de la simulación numérica (Capítulo 5). Esto significa que es posible conocer que tan grave será la contaminación en toda la región \mathbf{D} , debido a la suma de los contaminantes que se emiten por las fuentes puntuales con tasas $q_i(t)$, $i=1, \dots, N$ y por la distribución inicial $\phi_k^0(r)$ de dichas sustancias. Cuando el pronóstico de la concentración promedio para cada contaminante es menor que una concentración de interés o la norma de calidad del aire respectiva (Tabla 1.1.4), entonces las fuentes de emisión pueden trabajar al mismo ritmo, es decir, con la tasa de emisión $q_i(t)$, $i=1, \dots, N$. Sin embargo, si en el pronóstico de la concentración promedio excede la concentración fijada o la norma de calidad de aire, entonces se deben tomar acciones para evitar este evento. En este caso las acciones consistirán en restringir (acotar) o redefinir las tasas de cada fuente puntual de tal forma que si se cumpla la norma de calidad del aire.

Es posible que dentro de la región de estudio \mathbf{D} exista una zona de especial sensibilidad que represente el objeto de protección. Por lo tanto, sin pérdida de generalidad, se considera una zona Ω contenida en \mathbf{D} , para la cual se quiere que la concentración promedio de los contaminantes se mantenga en niveles aceptables. Con el fin de formular esto último se define el funcional $\mathbf{J}_{\Omega, \tau}^k$ como sigue:

$$\mathbf{J}_{\Omega, \tau}^k = J_{\Omega, \tau}(\phi_k) = \frac{1}{|\Omega| \cdot \tau} \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \phi_k(r, t) dr dt \quad (3.11)$$

donde $|\Omega|$ es el volumen de la región de interés. $\mathbf{J}_{\Omega, \tau}^k$ representa la concentración promedio, en la región Ω y durante el tiempo por considerar en el control ($\tau > 0$), mientras que J_k denota la concentración máxima admisible que puede ser tolerada por la acumulación de las emisiones industriales del k -ésimo contaminante.

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

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

$$J_{\Omega, \tau}(\phi_k) \leq J_k, \quad k=1, \dots, K \quad (3.12)$$

Finalmente, se debe tener en cuenta que si hay una solución no trivial al problema de control, entonces, por linealidad del modelo (2.1) - (2.9) y del funcional (3.11) se tiene una infinidad de soluciones, las cuales consisten en tomar fracciones de las tasas redefinidas. Esto representa una ventaja ya que se pueden buscar en este espacio de soluciones aquellas tasas que sean adecuadas a cada factoría.

3.4 Principio de dualidad

Con el fin de reformular la concentración promedio $\mathbf{J}_{\Omega,\tau}^k$ en función de la solución g_k del modelo adjunto (3.2)- (3.9) se considera el siguiente producto respecto $L_2(\mathbf{D} \times 0, T)$, donde ϕ_k es la solución del modelo de dispersión (2.1)-(2.9),

$$L\phi_k, g_k = \sum_{i=1}^N \int_0^T \int_{\mathbf{D}} q_{ik}(t) \delta(r-r_i) g_k(r_i, t) dr dt = \sum_{i=1}^N \int_0^T q_{ik}(t) g_k(r_i, t) dt \quad (3.13)$$

Por otra parte, también se tiene que

$$L\phi_k, g_k = \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \left(\frac{\partial \phi_k}{\partial t} + A\phi_k \right) g_k(r_i, t) dr dt$$

Si se aplican las condiciones de frontera e iniciales que satisfacen las soluciones ϕ_k y g_k respectivamente, entonces, realizando los cálculos en forma similar a los de la sección 2.2 se obtiene

$$L\phi_k, g_k = \int_0^T \int_{\mathbf{D}} \left(-\frac{\partial g_k}{\partial t} - A^* g_k \right) \phi_k(r, t) dr dt - \int_{\mathbf{D}} \phi_k^0(r) g_k(r, 0) dr$$

es decir,

$$L\phi_k, g_k = \int_0^T \int_{\mathbf{D}} p(r, t) \phi_k(r, t) dr dt - \int_{\mathbf{D}} \phi_k^0(r) g_k(r, 0) dr \quad (3.14)$$

Igualando (3.13) y (3.14) se tiene

$$\int_0^T \int_{\mathbf{D}} p(r, t) \phi_k(r, t) dr dt = \sum_{i=1}^N \int_0^T q_{ik}(t) g_k(r_i, t) dt + \int_{\mathbf{D}} \phi_k^0(r) g_k(r, 0) dr$$

Con esta última ecuación, y considerando la definición (3.10) para el forzamiento p ,

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

se obtiene el principio de dualidad para la concentración promedio de los contaminantes en una zona de importancia ecológica Ω ,

$$J_{\Omega,\tau}(\phi_k) = \sum_{i=1}^N \int_0^T q_{ik}(t) g_k(r,t) dt + \int_{\mathbf{D}} \phi_k^0(r) g_k(r,0) dr \quad (3.15)$$

Esta ecuación muestra la dependencia explícita que tienen sobre la concentración promedio de los contaminantes en Ω las tasas de emisión y la distribución inicial de dichas sustancias en \mathbf{D} . Es importante notar que la solución g_k del problema adjunto (3.2) - (3.9) no depende de estos parámetros. Por lo tanto, g_k sólo es una función de peso que pondera a ϕ_k^0 y a las tasas de emisión $q_{ik}(t)$, $i=1, \dots, N$. Este resultado es fundamental para resolver el problema de control de emisiones industriales.

Aun cuando las funciones solución ϕ_k y g_k permiten estimar la misma concentración promedio $\mathbf{J}_{\Omega,\tau}^k$ a través de (3.11) y (3.15), estimaciones directa y adjunta, respectivamente, se debe entender que, en general, estas son funciones complementarias, ya que g_k en (3.15) sólo permite conocer la concentración promedio en Ω , mientras que ϕ_k nos permite conocer además la concentración del contaminante en toda la región de estudio \mathbf{D} . De esta forma, dependiendo de las preguntas por contestar asociadas al problema de contaminación se puede usar ϕ_k o g_k , o ambas.

3.5 Análisis de sensibilidad

La ecuación (3.15) permite hacer un análisis de sensibilidad de $\mathbf{J}_{\Omega,\tau}^k$ respecto de los parámetros q_{ik} , r_i y ϕ_k^0 ($i=1, \dots, N$), manteniendo U , μ , σ_k , Ω y τ fijos, sin necesidad de resolver en forma repetida el problema (2.1) - (2.9). Es decir, para estimar el cambio $\delta \mathbf{J}_{\Omega,\tau}^k$, cuando hay perturbaciones δq_{ik} , δr_i ($i=1, \dots, N$) y $\delta \phi_k^0$ respecto de un estado básico en los parámetros que definen al problema de emisiones industriales, se debe resolver sólo una vez el problema diferencial (3.2)-(3.9), almacenar la solución adjunta g_k , y posteriormente calcular la concentración

promedio evaluando las integrales en (3.15) para el estado básico. Para todas las posibles perturbaciones se puede evaluar nuevamente (3.15) con la misma función solución g_k , de esta forma, $\delta \mathbf{J}_{\Omega, \tau}^k$ es la diferencia de estas nuevas estimaciones con la del estado básico. Este procedimiento representa un trabajo computacional más simple, ya que es más económico evaluar integrales que resolver cada vez un problema diferencial como el (2.1)-(2.9).

En particular, este procedimiento resulta de gran utilidad cuando se busca la ubicación de una nueva fuente puntual dentro de la región de estudio \mathbf{D} , la cual cause un mínimo impacto sobre Ω . En este caso, hay que hacer un análisis de sensibilidad respecto de la nueva ubicación r_i para determinar el sitio más adecuado.

En una forma más general, es posible hacer un análisis de sensibilidad de $\mathbf{J}_{\Omega, \tau}$ respecto de todos los parámetros en el modelo de dispersión (2.1)-(2.9). Para esto, se considera a $\overline{\phi}_k^s, \mu_z, U, \sigma_k, \mu, \phi_k^0, q_{ik}$ y r_i ($i=1, \dots, N$) como estados básicos de los parámetros de los modelos directo y adjunto. Se denotan con $\overline{\delta \phi}_k^s, \delta \mu_z, \delta U, \delta \sigma_k, \delta \mu, \delta \phi_k^0, \delta q_{ik}$ y δr_i ($i=1, \dots, N$), a las pequeñas perturbaciones correspondientes a estos estados. Con estas perturbaciones ϕ_k sufre un cambio $\delta \phi_k$, y por lo tanto, $\mathbf{J}_{\Omega, \tau}^k$ cambia en $\delta \mathbf{J}_{\Omega, \tau}^k$. El objetivo ahora es estimar $\delta \mathbf{J}_{\Omega, \tau}^k$ hasta primer orden. Para lograr esto se considera a $\phi_k + \delta \phi_k$ como la solución del siguiente problema de dispersión:

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

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

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

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

$$\mu_z \frac{\partial \phi_k + \delta \phi_k}{\partial z} = -\nu_k^s \phi_k + \delta \phi_k \quad \text{en } S_H^+$$

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

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

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

donde δU y $\delta \mu$ se consideran nulos en la frontera $\partial \mathbf{D}$.

Si multiplicamos la primera ecuación por la solución g_k del modelo adjunto (3.2)-(3.9) e integramos en $\mathbf{D} \times (0, T)$ entonces, al eliminar los términos de segundo orden, se obtiene la estimación de primer orden para la anomalía $\delta \mathbf{J}_{\Omega, \tau}^k$ de la concentración promedio del contaminante en la región de interés Ω .

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{J}_{\Omega, \tau}^k &= \int_{\mathbf{D}} g_k(r, 0) \delta \phi_k^0 dr + \sum_{i=1}^N \int_0^T q_{ik}(t) \nabla g_k(r_i, t) \delta r_i dt + \sum_{i=1}^N \int_0^T \delta q_{ik}(t) g_k(r_i, t) dt \\ &- \int_0^T \int_{\mathbf{D}} g_k(r, t) \left(\delta U \cdot \nabla \phi_k + \nabla \cdot \delta \vec{\phi}_k^s - \nabla \cdot (\delta \mu \cdot \nabla \phi_k) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\delta \mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} \right) + \delta \sigma_k \phi_k \right) dr dt \end{aligned}$$

Esta última ecuación nos permite hacer el análisis de sensibilidad resolviendo sólo dos problemas diferenciales, el directo (2.1)-(2.9) y el adjunto (3.2)-(3.9), lo cual sigue presentando una ventaja computacional, ya que sólo hay que evaluar las integrales de la última ecuación en las perturbaciones correspondientes.

Capítulo 4

Control óptimo

4.1 Formulación del problema de programación lineal en el control de emisiones

El control de las fuentes puntuales de emisión es un tipo de problema inverso en el contexto de la modelación de la contaminación del aire. Este problema se puede formular como un problema variacional (Hinze et al., 2009; Yan y Zhou, 2009; Parra-Guevara y Skiba, 2006), o como un problema de programación matemática (Parra-Guevara et al., 2010; Cooper et al., 1996; Greenberg, 1995). Esta última forma tiene la ventaja de no modificar considerablemente el perfil básico de las tasas de emisión con las que operan las fuentes industriales, y por lo tanto, son más sencillas de implementar. Enseguida se describe dicho método.

El objetivo del problema de control es redefinir las tasas de emisión $Q_i(t)$, $i=1, \dots, N$, introduciendo parámetros positivos de amortiguamiento $\lambda_i \leq 1$, $i=1, \dots, N$ (Parra-Guevara et al., 2010; Cooper et al., 1996). Dichos parámetros determinan las nuevas tasas de emisión $q_i(t)$ en la forma

$$q_i(t) = \lambda_i Q_i(t), \quad i=1, \dots, N, \quad (4.1)$$

donde el valor $(1 - \lambda_i) \times 100$ representa la disminución porcentual de las emisiones desde la fuente i -ésima (disminución de la actividad industrial).

Tales parámetros se determinan a través del problema de optimización siguiente:

$$\begin{aligned} \underset{q_i}{\text{minimizar}} \quad & H = \sum_{i=1}^N \int_0^T c_i |Q_i(t) - q_i(t)| dt \\ \text{sujeto a:} \quad & J_{\Omega, \tau}(\phi_k) \leq J_k, \quad k=1, \dots, K \end{aligned} \quad (4.2)$$

Donde c_i es el costo (por unidad de masa) que se debe pagar por disminuir la actividad en la fuente i -ésima y J_k son las concentraciones de interés ó normas sanitarias para los contaminantes. Hay que observar que minimizar la función objetivo H significa cambiar lo menos posible las tasas de emisión actuales $Q_i(t)$ para que las concentraciones $J_{\Omega, \tau}(\phi_k)$ cumplan las normas sanitarias.

Por otro lado, si tomamos la forma alternativa (formulación adjunta) para la concentración promedio del k -ésimo contaminante (Eq. 3.15) entonces podemos definir

$$v_k = J_k - \int_{\mathbf{D}} g_k(r, 0) \phi_k^0(r) dr, \quad k = 1, \dots, K \quad (4.3)$$

donde v_k es el nuevo indicador de la calidad del aire. También es posible reescribir a la función objetivo H como

$$H = \sum_{i=1}^N c_i (1 - \lambda_i) \int_0^T Q_i(t) dt$$

Esto nos permite replantear el problema de optimización como

$$\begin{aligned} \text{minimizar}_{\lambda_i} \quad & F = - \sum_{i=1}^N c_i \lambda_i \int_0^T Q_i(t) dt \\ \text{sueto a:} \quad & \sum_{i=1}^N \lambda_i \int_0^T Q_{ik}(t) g_k(r_i, t) \leq v_k, \quad k = 1, \dots, K \end{aligned} \quad (4.4)$$

Este es un problema de programación lineal con respecto a los parámetros λ_i , ya que tanto la nueva función objetivo F como las restricciones son lineales.

Este conjunto de ecuaciones pueden escribirse en forma matricial como:

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & F = \mathbf{a}\boldsymbol{\lambda} \\ \text{sueto a:} \quad & \begin{cases} \mathbf{B}\boldsymbol{\lambda} \leq \mathbf{v} \\ 0 \leq \boldsymbol{\lambda} \leq 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Donde $\mathbf{a} = a_1, a_2, \dots, a_N$, $a_i = -c_i \int_0^T Q_i(t) dt$, $\boldsymbol{\lambda} = \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$, $\mathbf{v} = v_1, v_2, \dots, v_K$ y

$\mathbf{B} = b_{ki}$ $K \times N$ es la matriz de coeficientes de transferencia:

$$b_{ki} = \int_0^T Q_{ik}(t) g_k(r_i, t) dt \quad (4.6)$$

De esta forma, el problema de control de emisiones ha sido reducido a un problema de optimización en el espacio euclidiano \mathbb{R}^N , cuyo espacio de factibilidad es

$$\Psi = \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^N : 0 \leq \boldsymbol{\lambda} \leq 1, \mathbf{B}\boldsymbol{\lambda} \leq \mathbf{v} \quad (4.7)$$

4.2 Existencia de las soluciones

Para determinar la existencia de soluciones en el problema (4.5) se analiza el conjunto definido por (4.7). El espacio de factibilidad Ψ es no vacío, ya que $0 \in \Psi$, además, éste es un conjunto acotado ya que $0 \leq \lambda \leq 1$. Con el fin de mostrar que Ψ es un conjunto cerrado, se observa que si $\mathbf{x} \in \overline{\Psi}$ entonces hay una sucesión λ_n en Ψ tal que $\lambda_n^i \rightarrow x^i$ ($1 \leq i \leq N$). Para i fijo, se puede estimar que

$$x_i < \varepsilon + \lambda_n^i \leq \varepsilon + 1 \quad \text{y} \quad 0 \leq \lambda_n^i < x_i + \varepsilon, \quad \forall \varepsilon > 0 \quad \text{y} \quad n > n_0,$$

por lo tanto, $0 \leq x_i \leq 1$, $i = 1, \dots, N$. Por otra parte, hay que notar que

$$\|\mathbf{B}\mathbf{x} - \mathbf{B}\lambda_n\|_2 \leq \|\mathbf{B}\|_2 \|\mathbf{x} - \lambda_n\|_2 \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad n \rightarrow \infty,$$

Ya que $\|\mathbf{B}\|_2 > 0$ y $\|\mathbf{B}\|_2 < \infty$

es decir

$$(\mathbf{B}\lambda_n)_k \rightarrow (\mathbf{B}\mathbf{x})_k \quad \text{cuando} \quad n \rightarrow \infty, \quad 1 \leq k \leq K.$$

De este modo,

$$(\mathbf{B}\mathbf{x})_k = (\mathbf{B}\mathbf{x})_k - (\mathbf{B}\lambda_n)_k + (\mathbf{B}\lambda_n)_k < \varepsilon + \nu_k \quad \forall \varepsilon > 0 \quad \text{y} \quad n > n_0,$$

por lo tanto, $(\mathbf{B}\mathbf{x})_k \leq \nu_k$, $k = 1, \dots, K$. Se concluye que $\mathbf{x} \in \Psi$, y por lo tanto $\overline{\Psi} \subset \Psi$.

Ya que el espacio de factibilidad Ψ es no vacío, acotado y cerrado en el espacio euclidiano \mathbb{R}^N entonces podemos concluir que Ψ es un conjunto compacto.

Por otra parte, para mostrar que el espacio de factibilidad Ψ es un conjunto convexo, se observa que si $t \in (0, 1)$ y $\lambda_1, \lambda_2 \in \Psi$ entonces

$$0 \leq t\lambda_1 \leq t \quad \text{y} \quad 0 \leq (1-t)\lambda_2 \leq 1-t.$$

Sumando las últimas dos estimaciones, tenemos que

$$0 \leq t\lambda_1 + (1-t)\lambda_2 \leq 1.$$

Ahora, se observa que

$$\mathbf{B}(t\lambda_1 + (1-t)\lambda_2) = t\mathbf{B}\lambda_1 + (1-t)\mathbf{B}\lambda_2 \leq t\mathbf{v} + (1-t)\mathbf{v} \leq \mathbf{v},$$

y por lo tanto, $t\lambda_1 + (1-t)\lambda_2 \in \Psi$.

Es importante notar que la solución del problema de programación lineal (4.5) siempre existe porque el espacio de factibilidad Ψ es un conjunto no vacío y compacto en \mathbb{R}^N , y la función objetivo F es continua (Teorema de Weierstrass; Luenberger, 1984). Esta solución pertenece a la frontera $\partial\Psi$ del espacio de factibilidad (Bazaraa et al., 2009), y tiene por lo menos una constante óptima de amortiguamiento λ_j que es estrictamente menor que la unidad, es decir, al menos una fuente de emisión de contaminantes debe disminuir su tasa de emisión con el fin de cumplir con las normas de la calidad del aire en la zona Ω . Hay que tener en cuenta que en esta estrategia de control de emisiones algunas constantes de amortiguamiento óptimas pueden ser igual a la unidad, lo que significa que las tasas de emisión de las fuentes respectivas no necesitan modificarse.

Por otra parte, observamos que el problema de programación lineal (4.5) podría tener muchas soluciones con el mismo valor de la función objetivo F (Bazaraa et al., 2009), y debido a la convexidad de Ψ y a la linealidad de F , todas estas soluciones forman un conjunto convexo C en Ψ (Parra-Guevara et al., 2010). El criterio para elegir una de tales soluciones podría ser la facilidad de la técnica para implementar ésta en una situación real.

Con el fin de determinar una solución del problema de programación lineal (4.5), se puede aplicar un método de optimización a gran escala basado en LIPSOL (Linear Interior Point Solver; Zhang, 1995), que es una variante del algoritmo predictor-corrector de Mehrotra (1992), un método de punto interior primal-dual. También, para la optimización de mediana escala se puede aplicar un método de proyección que es una variante del conocido método simplex para programación lineal (Dantzig et al., 1995). Ya que los métodos de punto interior reducen los tiempos de búsqueda de los valores óptimos (Zhang, 1995), éstos representan una buena alternativa en los problemas de contaminación del aire con muchas fuentes puntuales. En este trabajo se utiliza la rutina LINPROG de MATLAB que tiene implementado los dos métodos antes mencionados. A continuación se describen éstos brevemente.

4.3 Dos métodos de solución para el problema de programación lineal

Teorema de dualidad de programación lineal

Consideremos estos dos problemas de programación lineal

Problema A	Problema B
minimizar $c^T x$	maximizar $y^T b$
$Ax \geq b$	$y^T A \leq c^T$
$x \geq 0$	$y \geq 0$

Este par de problemas se llaman problemas duales por las muchas relaciones entre ellos, tales como las siguientes (Bazaraa et al., 2009; Luenberger, 1984):

i) Si uno de los problemas tiene una solución entonces el otro también y el mínimo de $c^T x$ es igual al máximo de $y^T b$.

ii) Para cada problema el vector solución se halla de manera usual. El vector solución del problema dual puede obtenerse entonces tomando las variables débiles en orden, asignando a la base final el valor 0 y dando a cada una de las otras el valor correspondiente de $-h_j$.

A) Método Simplex

Tradicionalmente, los problemas de programación lineal se resuelven usando el método SIMPLEX, el cual evoluciona por los puntos extremos de la región factible (región acotada por las restricciones) hasta encontrar el óptimo del problema.

Sea el problema de programación lineal

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && H(x)=c^T x \\ &\text{sujeto a:} && Ax \leq b \\ &&& 0 \leq x \end{aligned} \tag{4.8}$$

Donde A es una matriz $m \times n$, c y x son vectores de dimensión n y b es un vector de dimensión m .

Si hacemos $j=k$ en (4.14) tenemos

$$v_k = v_{1k}v_1 + \dots + v_{mk}v_m \quad (4.16)$$

Ahora multipliquemos a (4.16) por p y hacemos la sustracción de (4.12) para hallar

$$(x_1 - pv_{1k})v_1 + (x_2 - pv_{2k})v_2 + \dots + (x_m - pv_{mk})v_m + pv_k = b \quad (4.17)$$

De modo similar, a partir de (4.13) y (4.15) el nuevo valor de H será

$$(x_1 - pv_{1k})c_1 + (x_2 - pv_{2k})c_2 + \dots + (x_m - pv_{mk})c_m + pc_k = H_1 - ph_k \quad (4.18)$$

Si multiplicamos por p_1 a (4.16) y lo sustraemos de (4.14) hallamos

$$v_j = (v_{1j} - p_1v_{1k})v_1 + \dots + (v_{mj} - p_1v_{mk})v_m + p_1v_k \quad (4.19)$$

Si $h_k > 0$ en (4.18). En este caso es óptimo hacer p tan grande como sea posible sin que un coeficiente $x_i - pv_{ik}$ sea negativo. Esto sugiere escoger

$$p = \min_i (x_i/v_{ik}) = x_l/v_{lk} \quad (4.20)$$

Con este valor de p el coeficiente c_l se vuelve 0, los otros son no negativos y tenemos un nuevo punto factible extremo con valor H

$$H' = H_1 - ph_k \quad (4.21)$$

Por otro lado de (4.19) se determina que

$$p_1 = \min_i (v_{ij}/v_{ik}) = v_{lj}/v_{lk} \quad (4.22)$$

De estos resultados se puede concluir que

$$x'_i = \begin{cases} x_i - (x_l/v_{lk})v_{ik} & \text{para } i \neq l \\ x_i/v_{lk} & \text{para } i = l \end{cases} \quad (4.23)$$

$$v'_{ij} = \begin{cases} v_{ij} - (v_{lj}/v_{lk})v_{ik} & \text{para } i \neq l \\ v_{ij}/v_{lk} & \text{para } i = l \end{cases} \quad (4.24)$$

Que forman la nueva base. El proceso se repite ahora hasta que todos los h_j sean negativos o hasta que para algún h_k positivo ningún v_{ik} sea positivo.

Este conjunto de ecuaciones puede resumirse en forma compacta como

$$\begin{bmatrix} x_1 & v_{11} & v_{12} & \dots & v_{1,n+m} \\ x_2 & v_{21} & v_{22} & \dots & v_{2,n+m} \\ \vdots & & & & \vdots \\ x_m & v_{m1} & v_{m2} & \dots & v_{m,n+m} \\ H_1 & h_1 & h_2 & \dots & h_{n+m} \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

Llamando v_{lk} el pivote, todas las entradas de la fila del pivote están divididas por el pivote; la columna del pivote se vuelve cero excepto para un 1 en la posición del pivote y todas las otras entradas están sujetas a (4.23) y (4.24).

B) Método de punto interior

La técnica de optimización denominada de *puntos interiores* evoluciona por el interior de la región factible a diferencia del método SIMPLEX que evoluciona por los puntos extremos, disminuyendo considerablemente el tiempo de solución de los problemas. Es decir, en sistemas de gran tamaño el número de vértices aumenta exponencialmente con el número de variables, y por lo tanto, el proceso de búsqueda con el método SIMPLEX puede requerir gran tiempo de cómputo.

Consideremos el problema de programación lineal como:

$$\begin{aligned} &\text{maximizar} && c^T x \\ &\text{sujeto a:} && Ax \leq b \end{aligned} \quad (4.26)$$

Se asume que $c \neq 0$ y x son vectores de dimensión n , b es un vector de dimensión m y A es una matriz de $m \times n$ de rango completo $m \geq n$.

Si se introducen las variables de holgura v al problema (4.26), se tiene

$$\begin{aligned} &\text{maximizar} && c^T x \\ &\text{sujeto a:} && Ax + v = b \\ &&& v \geq 0 \end{aligned} \quad (4.27)$$

Donde v es el vector de dimensión m de las variables de holgura. En cada iteración k , con v^k y x^k como la iteración actual, una transformación lineal se aplica al espacio de solución:

$$\tilde{v} = D_k v$$

Con

$$D_k = \text{diag} \left[\frac{1}{v_1^k}, \frac{1}{v_2^k}, \dots, \frac{1}{v_m^k} \right]$$

Las variables de holgura se escalan de tal manera que x^k sea equidistante a todos los hiperplanos, generando el espacio cerrado cuya intersección forma el espacio factible del conjunto de restricciones. Rescribiendo (4.27) en términos de las variables de holgura escaladas, se tiene:

$$\begin{aligned} &\text{maximizar} && c^T x \\ &\text{sueto a:} && Ax + D_k^{-1} \hat{v} = b \\ &&& \hat{v} \geq 0 \end{aligned} \tag{4.28}$$

El conjunto de las variables de holgura escaladas factibles están en el conjunto:

$$S = \{ \hat{v} \in R^n \mid Ax + D_k^{-1} \hat{v} = b \text{ para } x \in F \}$$

Si la matriz A es de rango completo, entonces

$$\hat{v} = D_k (b - Ax)$$

y

$$x(\hat{v}) = (A^T D_k^2 A)^T D_k (D_k b - \hat{v})$$

La nueva dirección factible d_x^k es obtenida de la solución de un sistema lineal de ecuaciones:

$$(A^T D_k^2 A) d_w^k = c \tag{4.29}$$

La dirección correspondiente de las variables de holgura es:

$$d_v^k = -A d_x^k \tag{4.30}$$

Esto lleva a la siguiente fórmula de actualización:

$$x^{k+1} = x^k + \alpha d_x^k \tag{4.31}$$

Una propiedad importante es que x^k converge a la solución óptima. Lo anterior puede ser sintetizado como sigue:

i) Sea x^0 un punto interior, escoger un valor γ de tal manera que:

$$Ax^0 < b \text{ y } 0 < \gamma < 1, \quad k = -1$$

ii) Calcular la holgura (distancia del punto a cada restricción) $k = k + 1$:

$$v^k = b - Ax^k = [v_1^k, v_2^k, \dots, v_m^k]^T$$

iii) Calcular la matriz diagonal:

$$D_k = \text{diag} \left[\frac{1}{v_1^k}, \frac{1}{v_2^k}, \dots, \frac{1}{v_m^k} \right]$$

iv) Calcular la proyección del punto actual sobre la periferia de la esfera. Resolver el sistema de ecuaciones para d_x^k :

$$(A^T D_k D_k A) d_x^k = c$$

v) Escalar la dirección proyectada d_x^k

$$d_v^k = -A d_x^k = (d_v)_1, (d_v)_2, \dots, (d_v)_m^T$$

vi) Calcular la longitud del paso a tomar en la dirección d_x^k :

$$\alpha = \gamma \max \left\{ \frac{v_i^k}{(d_v)_i} < 0 : (d_v)_i < 0 : i = 1, 2, \dots, m \right\}$$

Calcular el nuevo punto interior:

$$x^{k+1} = x^k + \alpha d_x^k$$

Si $\frac{|b^T y^k - c^T x^k|}{\max 1, |c^T x^k|} < \varepsilon$ termina, de lo contrario, ir al paso 2.

El paso 2 asegura que el punto interior se encuentra dentro de la región factible, esto es, $v_i > 0$. Aunque v_i se acerque a 0 por muchas restricciones, nunca es igual a 0. Los pasos 5 y 6 ajustan el elipsoide interior para que sea tan grande como sea posible en la región factible. El paso 7 asegura que el gap de la dualidad vaya a 0, esto es, la diferencia entre los valores de las funciones objetivo primal y dual sea 0.

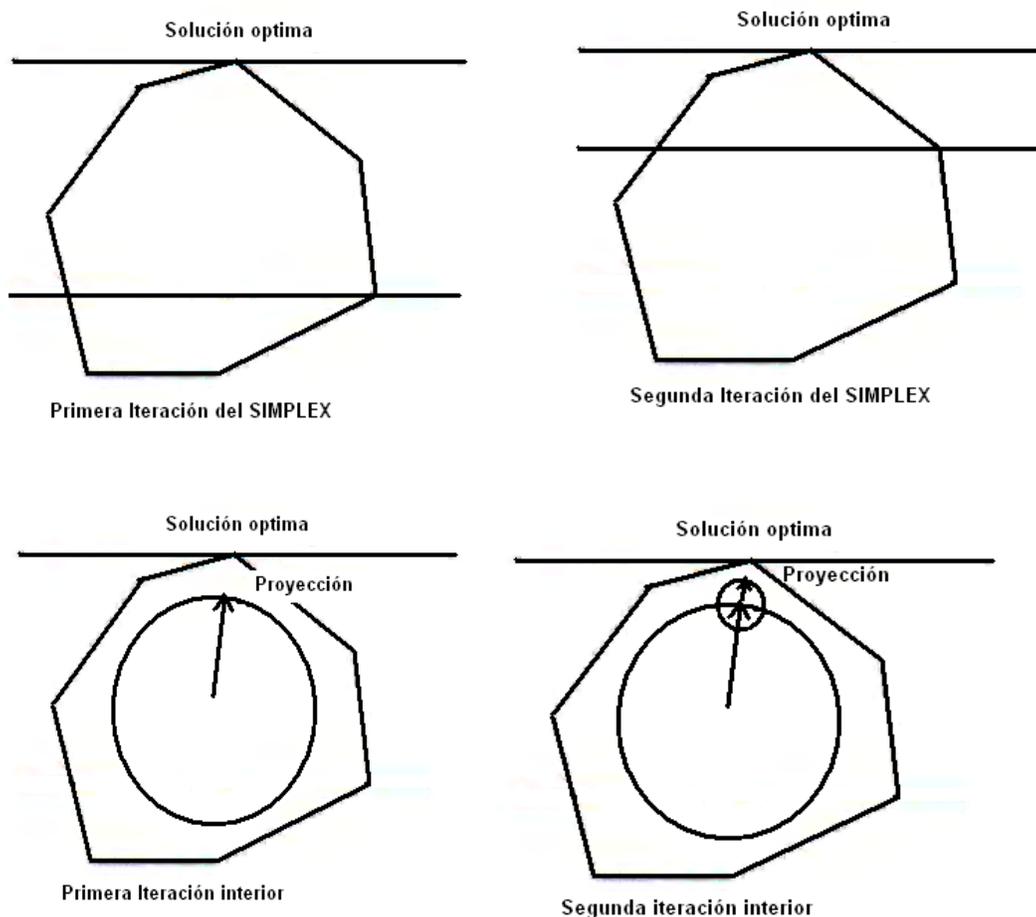


Fig. 4.4.1 Ejemplo de la diferencia geométrica entre el método simplex y el método de punto interior.

Capítulo 5

Esquema de solución numérica y ejemplos

La ecuación de dispersión (transporte) aparece en el estudio de la propagación de sustancias en diferentes medios. La solución de dicha ecuación representa la concentración de la sustancia que se dispersa y es una información muy importante en el estudio de diversos problemas ambientales como son: estimación del impacto ambiental por derrames de petróleo, ubicación de nuevas plantas industriales, determinación del sitio de impacto de una explosión nuclear, control de emisiones industriales y remediación de sistemas acuáticos contaminados. Debido a la complejidad de estos problemas, no es posible en general obtener una solución analítica para la ecuación de transporte, por lo que es necesario usar técnicas numéricas para hallar una solución aproximada. Dentro de los métodos numéricos para tratar esta ecuación destacan aquellos que generan esquemas discretos que satisfacen una ecuación de balance de masa similar a la del problema continuo, y cuya implementación computacional sea eficiente y sencilla. La primera característica es indispensable para mantener el sentido físico del modelo, mientras que las restantes se requieren para resolver problemas de gran escala que involucran regiones en la atmósfera o el océano donde se observan procesos de dispersión de sustancias. En estos casos el esfuerzo computacional se debe reducir con el fin de hacer predicciones en un tiempo razonable. Los métodos de separación de operadores son especialmente útiles en estas situaciones, ya que se han desarrollado para reducir problemas más complejos de la física matemática a una cadena de problemas más simples, los cuales pueden ser eficientemente resueltos en una computadora (Skiba, 1997; Skiba, 1993; Marchuck, 1986). Este tipo de reducción consiste en separar al operador que caracteriza la ecuación de estudio como una suma de operadores de estructura más simple. Es importante observar que los métodos de separación de operadores se usan en la discretización de la variable temporal en el modelo continuo, mientras que la discretización de las variables espaciales se realiza con técnicas de diferencias finitas o elemento finito. Por lo tanto, lo que permite que el modelo discreto conserve las propiedades físicas del modelo continuo es una adecuada combinación de las aproximaciones en espacio y tiempo.

5.1 Esquema de Crack-Nicolson

Una idea central en el esquema de separación de operadores componente por componente es el esquema de Crack-Nicolson (Crack y Nicolson, 1947), el cual permite discretizar el modelo respecto del tiempo. Para representar este esquema es posible considerar el siguiente problema de evolución general que contiene como caso particular al modelo de dispersión (2.1)-(2.9).

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

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

Se asume que ϕ^0 y f son funciones suficientemente suaves con el fin de que la solución ϕ tenga derivadas continuas respecto del tiempo y pueda aproximarse con polinomios de Taylor. Además, se considera que el operador diferencial denotado por A ya se ha discretizado en espacio usando alguna técnica de diferencias finitas de tal forma que se tiene una matriz positiva-semidefinida. Por lo tanto, en el proceso de discretización total del modelo, sólo falta la aproximación temporal.

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

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

$$\phi(t_l) = \phi(t_{l+\frac{1}{2}}) - \frac{\tau}{2} \phi'(t_{l+\frac{1}{2}}) + \left(\frac{\tau}{2}\right)^2 \frac{\phi''(t_{l+\frac{1}{2}})}{2!} - \left(\frac{\tau}{2}\right)^3 \frac{\phi'''(t_{l+\frac{1}{2}})}{3!} + \dots$$

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

$$\frac{\phi(t_{l+1}) - \phi(t_l)}{\tau} = \phi'(t_{l+\frac{1}{2}}) + o(\tau^2)$$

$$\frac{\phi(t_{l+1}) + \phi(t_l)}{2} = \phi(t_{l+\frac{1}{2}}) + o(\tau^2)$$

Aplicando estas dos fórmulas en (5.1), y despreciando el error de truncamiento, es decir, los términos $o(\tau^2)$, se obtiene el modelo discreto de segundo orden llamado esquema de Crank-Nicolson:

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

Donde ϕ^l denota la aproximación de, por lo menos, segundo orden para $\phi(t_l)$, $f^{l+\frac{1}{2}} = f(t_{l+\frac{1}{2}})$ y $A^l = A(t_{l+\frac{1}{2}})$.

Agrupando términos en la última ecuación se tiene que

$$\left(I + \frac{\tau}{2} A^l\right) \phi^{l+1} = \left(I + \frac{\tau}{2} A^l\right) \phi^l + \tau f^{l+\frac{1}{2}}, \quad l = 0, \dots, M-1 \quad (5.3)$$

$$\phi^0 = \phi(0)$$

Por lo cual se concluye que el esquema es implícito. Es importante notar que para calcular la aproximación de ϕ en cada nivel de tiempo es necesario resolver un sistema lineal de ecuaciones algebraicas donde la matriz del sistema $\left(I + \frac{\tau}{2} A^l\right)$ es definida positiva (no singular), y por lo tanto, la solución existe de forma única. Esta característica es esencial y se repite en los métodos de separación de operadores que se exponen más adelante.

El esquema definido por (5.3) es estable respecto de pequeñas perturbaciones en la condición inicial y el forzamiento. Para mostrar esto se considera el siguiente resultado sobre la estimación de la norma (Skiba, 2005).

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

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

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

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

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

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

Tomando la norma sobre (5.4) se tiene

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

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

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

Se obtiene que

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

Finalmente, es posible escribir

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

Ya que (5.4) es un proceso lineal, entonces, de la ultima acotación, se concluye que $\forall \tau > 0$ y $T < \infty$, las perturbaciones de ϕ son pequeñas cuando las perturbaciones del forzamiento y la condición inicial también son pequeñas (estabilidad incondicional).

Según el Teorema de Convergencia de Lax (Skiba, 2005), un esquema de aproximación numérica que presenta estabilidad, y cuyo error de truncamiento es al menos $o(\tau)$ (consistencia), es convergente. Es decir, cuando $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ y $\tau \rightarrow 0$ se tiene que

$$|\phi_{ijk}^l - \phi(r_{ijk}, t_l)| \rightarrow 0$$

Ya que el esquema de Crank-Nicolson presenta estabilidad incondicional y un error de truncamiento $o(\tau^2)$ se concluye que es convergente.

Las características de este esquema de solución numérica indican que este método es una buena técnica para resolver el modelo de dispersión (2.1)-(2.9), sin embargo, se requiere de un gran esfuerzo computacional para realizar (5.3), ya

que la dimensión de la matriz A es igual al número de nodos considerados en la discretización del dominio \mathbf{D} , que en general es un número grande, y por lo tanto, se complica la solución del sistema algebraico, lo que implica un alto tiempo de cómputo para obtener la solución de los sistemas algebraicos en (5.3). La alternativa a esta dificultad computacional es un esquema de separación de operadores.

5.2. Separación de operadores componente por componente

Algunos problemas de la física matemática pueden ser reducidos a una cadena de problemas más simples los cuales son resueltos en forma eficiente por computadora. Este tipo de reducción es posible en los casos donde el operador positivo semidefinido, que caracteriza al modelo, es descompuesto en la suma de operadores positivos semidefinidos con estructura simple (Skiba, 1997; Skiba, 1993; Marchuck, 1986). Tales métodos son conocidos como métodos de separación de operadores, siendo uno de los más importantes el esquema de separación componente por componente que se describe a continuación.

Se considera la ecuación de evolución general (5.1) en forma homogénea, y se supone que el operador diferencial A fue aproximado por diferencias finitas en espacio, de tal forma que se tiene una matriz positiva-semidefinida. Además, se supone que A se puede descomponer en tres matrices positivas-semidefinidas A_1 , A_2 y A_3 de tal forma que

$$A = A_1 + A_2 + A_3$$

Las matrices A_1 , A_2 y A_3 se aproximan de la siguiente forma

$$\Lambda_\alpha^l = A_\alpha(t_{l+\frac{1}{2}}) \text{ en } t_l \leq t \leq t_{l+1}, \alpha = 1, 2.$$

Donde se está considerando una malla en el tiempo similar a la de sección anterior. Se considera el siguiente esquema de solución numérica, el cual es una aplicación sucesiva del esquema de Crack-Nicolson para los operadores A_1 , A_2 y A_3

$$\frac{\phi^{l+\frac{1}{3}} - \phi^l}{\tau} + \Lambda_1^l \frac{\phi^{l+\frac{1}{3}} + \phi^l}{2} = 0 \quad (5.5)$$

$$\frac{\phi^{l+\frac{2}{3}} - \phi^{l+\frac{1}{3}}}{\tau} + \Lambda_2^l \frac{\phi^{l+\frac{2}{3}} + \phi^{l+\frac{1}{3}}}{2} = 0 \quad (5.6)$$

$$\frac{\phi^{l+1} - \phi^{l+\frac{2}{3}}}{\tau} + \Lambda_3^l \frac{\phi^{l+1} + \phi^{l+\frac{2}{3}}}{2} = 0 \quad (5.7)$$

Combinando (5.5), (5.6) y (5.7) para eliminar $\phi^{l+\frac{1}{3}}$ y $\phi^{l+\frac{2}{3}}$ se obtiene

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

Donde

$$T^l = (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_3^l)^{-1} (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_3^l) (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_2^l)^{-1} (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_2^l) (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_1^l)^{-1} (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_1^l)$$

Ya que $\|T^l\|_2 \leq 1$ (teorema 5.1), se tiene que el esquema (5.5)-(5.7) es absolutamente estable, se debe observar que

$$(I + \frac{\tau}{2} \Lambda_\alpha^l)^{-1} (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_\alpha^l) = (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_\alpha^l) (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_\alpha^l)^{-1}, \quad \alpha = 1, 2, 3.$$

Para demostrar que también que es consistente, es necesario considerar el siguiente teorema (Skiba, 2005).

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

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

Para τ suficientemente pequeño se cumple que $\frac{\tau}{2}\|\Lambda_1^l\|_2 < \frac{1}{2}$, $\frac{\tau}{2}\|\Lambda_2^l\|_2 < \frac{1}{2}$ y $\frac{\tau}{2}\|\Lambda_3^l\|_2 < \frac{1}{2}$ y por el Teorema 5.2 es posible escribir

$$T^l = I - \tau\Lambda^l + \frac{\tau^2}{2}[(\Lambda_1^l)^2 + (\Lambda_2^l)^2 + (\Lambda_3^l)^2 + 2\Lambda_1^l\Lambda_2^l + 2\Lambda_1^l\Lambda_3^l + 2\Lambda_2^l\Lambda_3^l] - \dots$$

Si además $\Lambda_1^l\Lambda_2^l = \Lambda_2^l\Lambda_1^l$, $\Lambda_1^l\Lambda_3^l = \Lambda_3^l\Lambda_1^l$ y $\Lambda_2^l\Lambda_3^l = \Lambda_3^l\Lambda_2^l$ entonces se obtiene que

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

La última ecuación muestra que el esquema (5.5)-(5.7) coincide con el esquema (5.3) hasta orden dos, y por lo tanto, se concluye que (5.5)-(5.7) es consistente. De nuevo, el Teorema de Lax implica la convergencia del esquema.

La ventaja obtenida con este método de separación de operadores es que la realización computacional del esquema (5.5)-(5.7) es más sencilla que la de (5.3), siempre y cuando A_1 , A_2 y A_3 representen la descomposición del operador A en las direcciones x , y y z , respectivamente. Esto se debe a que las fórmulas (5.5)-(5.7) implican la solución sucesiva de problemas unidimensionales con una estructura simple, es decir, sistemas algebraicos donde la matriz es tridiagonal de bajo orden, y por lo tanto, de fácil solución.

La desventaja del esquema (5.5)-(5.7) es que necesita que los operadores Λ_1^l , Λ_2^l y Λ_3^l conmuten, lo cual no se tiene en general. Cuando los operadores no conmutan la aproximación sólo es de primer orden. Por este motivo se propone un esquema más general.

Se aproxima A_1 , A_2 y A_3 en el tiempo como

$$\Lambda_\alpha^l = A_\alpha(t_l), \text{ en } t_{l-1} \leq t \leq t_{l+1}, \alpha = 1, 2 \text{ y } 3$$

Y se considera el nuevo esquema simétrico

$$\frac{\phi^{l-1} - \phi^{l-\frac{2}{3}}}{\tau} + \Lambda_1^l \frac{\phi^{l-1} + \phi^{l-\frac{2}{3}}}{2} = 0 \quad (5.8)$$

$$\frac{\phi^{l-\frac{2}{3}} - \phi^{l-\frac{1}{3}}}{\tau} + \Lambda_2^l \frac{\phi^{l-\frac{2}{3}} + \phi^{l-\frac{1}{3}}}{2} = 0 \quad (5.9)$$

$$\frac{\phi^{l-\frac{1}{3}} - \phi^l}{\tau} + \Lambda_3^l \frac{\phi^{l-\frac{1}{3}} + \phi^l}{2} = 0 \quad (5.10)$$

$$\frac{\phi^l - \phi^{l+\frac{1}{3}}}{\tau} + \Lambda_3^l \frac{\phi^l + \phi^{l+\frac{1}{3}}}{2} = 0 \quad (5.11)$$

$$\frac{\phi^{l+\frac{1}{3}} - \phi^{l+\frac{2}{3}}}{\tau} + \Lambda_2^l \frac{\phi^{l+\frac{1}{3}} + \phi^{l+\frac{2}{3}}}{2} = 0 \quad (5.12)$$

$$\frac{\phi^{l+\frac{2}{3}} - \phi^{l+1}}{\tau} + \Lambda_1^l \frac{\phi^{l+\frac{2}{3}} + \phi^{l+1}}{2} = 0 \quad (5.13)$$

Al combinar estas ecuaciones para eliminar $\phi^{l-\frac{2}{3}}$, $\phi^{l-\frac{1}{3}}$, ϕ^l , $\phi^{l+\frac{1}{3}}$ y $\phi^{l+\frac{2}{3}}$, se puede escribir

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

Donde

$$T^l = (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_1^l)^{-1} (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_1^l) (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_2^l)^{-1} (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_2^l) (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_3^l)^{-1} (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_3^l) \times \\ (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_3^l)^{-1} (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_3^l) (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_2^l)^{-1} (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_2^l) (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_1^l)^{-1} (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_1^l)$$

Desarrollando en serie de potencias la matriz T^l (teorema 5.2), se tiene

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

Donde $A^l = A(t_l)$. Esta última ecuación implica que el esquema (5.8)-(5.13) coincide hasta orden dos con el esquema de Crack-Nicolson aplicado a (5.1) en el intervalo $t_{l-1} \leq t \leq t_{l+1}$.

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

Se concluye que el esquema (5.8)-(5.13) es absolutamente estable (por el teorema 5.2 y $\|T^l\|_2 \leq 1$), y de orden dos de aproximación, independientemente de que las matrices Λ_1^l , Λ_2^l y Λ_3^l conmuten o no. El Teorema de Lax garantiza la convergencia.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_1^l) \phi^{l-\frac{2}{3}} = (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_1^l) \phi^{l-1} \\ (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_2^l) \phi^{l-\frac{1}{3}} = (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_2^l) \phi^{l-\frac{2}{3}} \\ (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_3^l) \phi^l = (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_3^l) (\phi^{l-\frac{1}{3}} + \tau f^l) \\ (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_3^l) (\phi^{l+\frac{1}{3}} - \tau f^l) = (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_3^l) \phi^l \\ (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_2^l) \phi^{l+\frac{2}{3}} = (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_2^l) \phi^{l+\frac{1}{3}} \\ (I + \frac{\tau}{2} \Lambda_1^l) \phi^{l+1} = (I - \frac{\tau}{2} \Lambda_1^l) \phi^{l+\frac{2}{3}} \end{array} \right. \quad (5.11)$$

donde $f^l = f(t_l)$.

5.3. Separación de operadores en la ecuación de transporte

Para aplicar el esquema (5.11) al modelo de dispersión (2.1)-(2.9) se definen A_1 , A_2 y A_3 como sigue (se omite el subíndice del k -ésimo contaminante para facilitar la explicación):

$$A_1 \phi = \frac{1}{3} \sigma \phi + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} u \phi + \frac{1}{2} u \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (\mu \frac{\partial \phi}{\partial x})$$

$$A_2 \phi = \frac{1}{3} \sigma \phi + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} v \phi + \frac{1}{2} v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} (\mu \frac{\partial \phi}{\partial y})$$

$$A_3\phi = \frac{1}{3}\sigma\phi + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial z}\tilde{w}\phi + \frac{1}{2}\tilde{w}\frac{\partial\phi}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu_z\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)$$

donde $\tilde{w} = w - v^s$. De esta forma el fenómeno se ha separado en las direcciones x , y y z , respectivamente.

Si se considera que $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$ se prueba que $A = A_1 + A_2 + A_3$, donde A es el operador diferencial positivo

$$A\phi = \mathbf{U} \cdot \nabla\phi + \nabla \cdot \overset{\rightarrow{s}}{\phi} - \nabla \cdot (\mu \nabla\phi) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu_z\frac{\partial\phi}{\partial z}\right) + \sigma\phi$$

Hay que observar que existen otras formas de elegir A_1 , A_2 y A_3 para la separación por componentes, sin embargo, la que se propone arriba es simétrica, lo cual permite el mismo tratamiento numérico para los tres operadores. Además, estos operadores son positivos semidefinidos, lo cual es una característica necesaria para aplicar el esquema (5.11) que no todas las descomposiciones presentan.

Para mostrar que cada uno de estos operadores son positivos semidefinidos, se considera, sin pérdida de generalidad, que el dominio \mathbf{D} es el cubo $0, X \times 0, Y \times 0, Z$. Se tiene entonces que

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

Aplicando las condiciones de frontera (2.6)-(2.7) en $x=0$ y $x=X$, es posible escribir el último término como

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

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

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

Un cálculo similar prueba que A_2 y A_3 también son operadores positivos semidefinidos.

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

El esquema de solución numérica (5.11) requiere que la discretización de las variables espaciales de cada operador diferencial preserve la propiedad anterior, es decir, las matrices A_1 , A_2 y A_3 deben ser también positivas semidefinidas. Para lograr esto, se discretiza en espacio usando diferencias finitas centradas de orden dos sobre una malla doble (tipo-C) de Arakawa. Las fórmulas de aproximación para cada término del operador A_1 son:

$$\left(\frac{1}{3}\sigma\phi\right)_{ijk} = \frac{1}{3}\sigma_{ijk}\phi_{ijk} \quad (5.12)$$

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

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

Donde $\Delta x > 0$ es el tamaño de paso para la discretización en x . Para discretizar los operadores A_2 y A_3 se usan fórmulas similares en la dirección y y z .

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

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

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

$$\left(\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u\phi) + \frac{1}{2}u\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{ijk} = \frac{u_{i+\frac{1}{2}jk} + u_{i-\frac{1}{2}jk}}{2}\frac{\phi_{i+1jk} - \phi_{i-1jk}}{2\Delta x} + \frac{\phi_{i+1jk} + \phi_{i-1jk}}{2}\frac{u_{i+\frac{1}{2}jk} - u_{i-\frac{1}{2}jk}}{2\Delta x}$$

Simplificando la última expresión se obtiene (5.13).

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

$$\sum_{i=1}^N (A_1 \phi_{i j k}) \phi_{i j k} = \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_{i j k}}{2} \phi_{i j k}^2 + \frac{\mu}{\Delta x^2} \sum_{i=1}^{N-1} (\phi_{i j k} - \phi_{i+1 j k})^2 + \frac{\mu}{\Delta x^2} (\phi_{1 j k}^2 + \phi_{N j k}^2) + \frac{1}{2\Delta x} (u_{N+\frac{1}{2} j k} \phi_{N j k} \phi_{N+1 j k} - u_{\frac{1}{2} j k} \phi_{0 j k} \phi_{1 j k}) - \frac{\mu}{\Delta x^2} (\phi_{N j k} \phi_{N+1 j k} + \phi_{0 j k} \phi_{1 j k})$$

Aplicando los cuatro casos discretos de las condiciones de frontera (2.6)-(2.7) en $x = 0$ y $x = X$, es posible describir los últimos términos para obtener

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

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

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

Donde $\phi \in \mathbb{R}^{N+M+L}$ y satisface las condiciones de frontera discretas (2.6)-(2.7).

En forma similar se prueba que la matrices A_2 y A_3 son positivas-semidefinidas, y por lo tanto, la matriz A cumple también con esta propiedad ($A = A_1 + A_2 + A_3$).

Dadas las características de los operadores A_1 , A_2 y A_3 antes descritas es posible aplicar el esquema de solución numérica (5.11) al modelo de dispersión (2.1)-(2.9). La realización de este esquema implica, con la discretización antes formulada, la solución sucesiva de sistemas lineales tridiagonales; esto se debe a que hay que resolver problemas unidimensionales en las direcciones x , y y z (desacoplados), los cuales se discretizaron con fórmulas de diferencias finitas centradas con tres puntos.

5.4. Ejemplos del control óptimo de fuentes puntuales

La dispersión de los contaminantes emitidos a la atmósfera por fuentes fijas o móviles es un fenómeno no estacionario en tres dimensiones. Sin embargo, durante los eventos extremos de contaminación de corto plazo (T representa algunas horas), cuando el movimiento vertical de la masa de aire es débil, entonces aumenta la concentración de los contaminantes cerca de la superficie de la tierra y de las fuentes de emisión. En el caso de una gran estabilidad atmosférica (inversión térmica), cuando los contaminantes se acumulan dentro de una delgada capa superficial de altura H , la estructura vertical del proceso puede ser ignorada $w = 0$. Así, integrado la ecuación de dispersión tridimensional en la

capa superficial $0, H$, y dividiendo entre H , se obtiene un modelo de dispersión bidimensional en la región D . Es decir, integrando la ec. (2.1) en $0, H$ se tiene

$$\int_0^H \left[\frac{\partial \phi_k}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi_k + \nabla \cdot \vec{\phi}_k - \nabla \cdot (\mu \nabla \phi_k) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial \phi_k}{\partial z} \right) + \sigma \phi_k \right] dz = \int_0^H \left[\sum_{i=1}^N q_{ik}(t) \delta(x_i - x_0) \delta(y_i - y_0) \delta(z_i - z_0) \right] dz \quad (5.15)$$

Considerando la concentración media en la columna de aire ($\varphi_k(r, t) = \frac{1}{H} \int_0^H \phi_k(r, t) dz$), y las condiciones de frontera en S_0 y S_H , se obtiene el modelo bidimensional

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \varphi_k - \nabla \cdot (\mu \nabla \varphi_k) + \sigma_k \varphi_k = \frac{1}{H} \sum_{i=1}^N q_{ik}(t) \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \quad \text{en } D \times (0, T) \quad (5.16)$$

$$\varphi_k(r, 0) = \varphi_k^0(r) \quad \text{en } D \quad (5.17)$$

$$\mu \frac{\partial \varphi_k}{\partial \vec{n}} - U_n \varphi_k = 0 \quad \text{en } S^- \quad (5.18)$$

$$\mu \frac{\partial \varphi_k}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{en } S^+ \quad (5.19)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad \text{en } D \quad (5.20)$$

y su adjunto

$$-\frac{\partial g_k}{\partial t} - \mathbf{U} \cdot \nabla g_k - \nabla \cdot (\mu \nabla g_k) + \sigma_k g_k = p(r, t) \quad (5.21)$$

$$g_k(r, T) = 0 \quad (5.22)$$

$$\mu \frac{\partial g_k}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{en } S^- \quad (5.23)$$

$$\mu \frac{\partial g_k}{\partial \vec{n}} + U_n g_k = 0 \quad \text{en } S^+ \quad (5.24)$$

$$p(r,t) = \begin{cases} \frac{1}{\tau|\Omega|}, & r \in \Omega \text{ y } t \in (T-\tau, T) \\ 0, & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (5.24)$$

La solución $\varphi_k(r,t)$ representa la concentración promedio (en una columna de aire de altura H) del k -ésimo contaminante, en el punto $r = (x, y)$ y en el instante t .

Debido a esta aproximación, la concentración promedio para el k -ésimo contaminante, durante el intervalo de tiempo $(0, T)$, satisface:

$$\mathbf{J}_{\Omega, \tau}(\phi_q^k) = \mathbf{J}_{\Omega_2, \tau}(\phi_{\frac{1}{H}q}^k), \quad \forall \vec{q}$$

Donde $\Omega = \Omega_2 \times 0, H$ es la zona de control. Por lo tanto, de acuerdo con la última ecuación, cuando la estrategia de control descrita en el capítulo 4 se aplica al modelo bidimensional, podemos encontrar las tasas óptimas de emisión para el problema tridimensional.

Se considera ahora una capa superficial de altura $H = 200 \text{ m}$ y un dominio $D = (0, 8000 \text{ m}) \times (0, 6000 \text{ m})$ con cuatro fuentes puntuales ubicadas en $r_1 = (1000, 3000)$, $r_2 = (3000, 2000)$, $r_3 = (3000, 4000)$ y $r_4 = (5000, 3000)$ cuyas emisiones de dióxido de azufre (SO_2) presentan la misma tasa de emisión no estacionaria $Q_i(t) = Q(t) \text{ (gs}^{-1}\text{)}$ ($i = 1, \dots, 4$), donde

$$Q(t) = \begin{cases} \frac{20}{1296}t, & 0 \leq t < 1800 \\ \frac{1000}{36}, & 1800 \leq t \leq 25200 \\ \frac{1000}{36} - \frac{10}{1296}(t - 25200), & 25200 \leq t < 28800 \end{cases}$$

La condición inicial de $SO_2 \text{ (}\mu\text{gm}^{-3}\text{)}$ es la distribución gaussiana

$$\varphi_1^0(r) = 10^{-2} \exp\left(-\left(\frac{x-4000}{1000}\right)^2 - \left(\frac{y-3000}{1000}\right)^2\right)$$

en D (notar que $K = 1$). Los coeficientes de transformación química y de difusión σ y μ se supone que son iguales a 0.0002 s^{-1} y $55.55 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ respectivamente (valores tomados de Shir and Shieh, 1974). La velocidad del viento no-divergente

$\mathbf{U}=(u, v)$ es generada por la función de corriente $\psi = 1.0y$: $u = \frac{\partial \psi}{\partial y} = 1.0 \text{ ms}^{-1}$,
 $v = -\frac{\partial \psi}{\partial x} = 0$, y las líneas de corriente tienen la forma de líneas rectas con
dirección de este a oeste. El modelo de dispersión bidimensional y su adjunto se
consideran en el intervalo $(0, T)$ con $T = 28800 \text{ s}$. Se va a observar la
concentración promedio de la contaminación $\mathbf{J}_{\Omega_2, \tau}^1$ en la zona
 $\Omega_2 = 6000 \text{ m}, 8000 \text{ m} \times 2000 \text{ m}, 4000 \text{ m}$ durante las últimas cuatro horas
($\tau = 14400 \text{ s}$) para que no se rebase la tasa de $80 \mu\text{gm}^{-3}$.

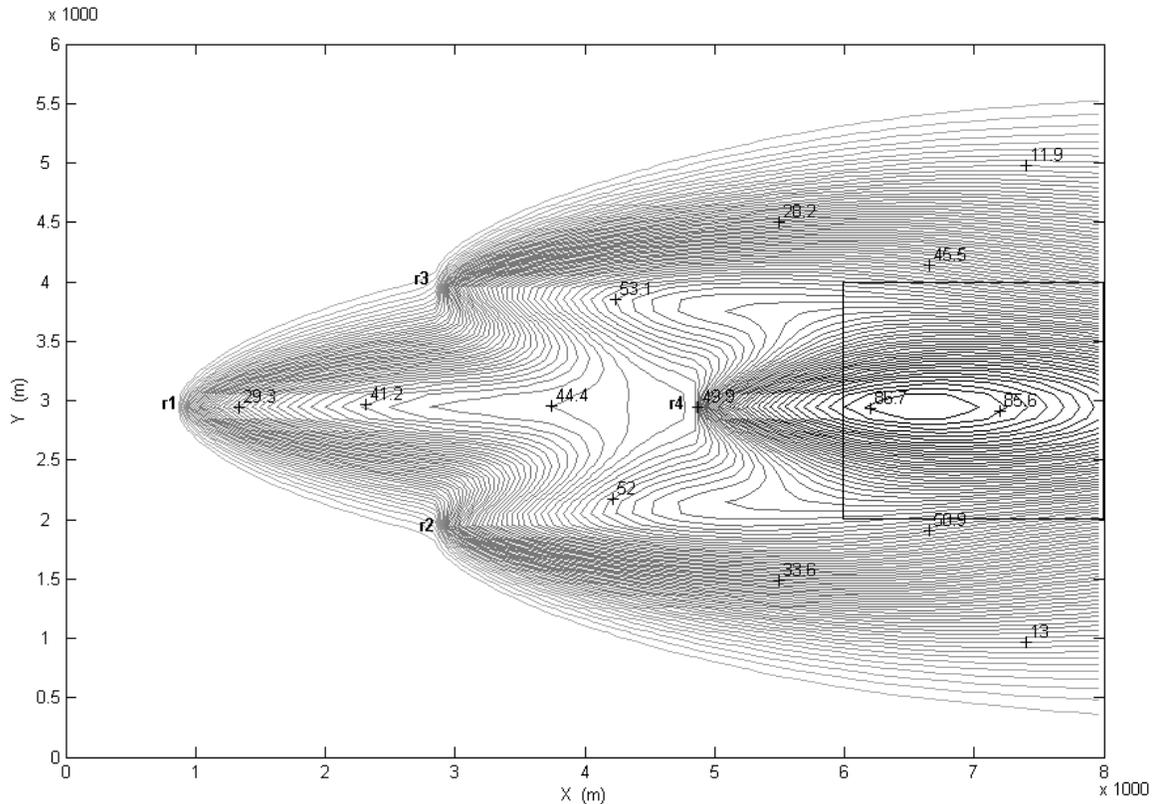


Fig. 5.1. Isolíneas de la solución del modelo de dispersión $\varphi_1(r, t)$ en el dominio D en $t = 28800 \text{ s}$

Las isolíneas de la solución del modelo de dispersión $\varphi_1(r, t)$ en $t = 28800 \text{ s}$ son mostradas en la Fig. 5.1, donde la zona Ω_2 ha sido remarcada. Se observa un aumento de la concentración de contaminantes en Ω_2 debido al viento. La concentración promedio de la contaminación $\mathbf{J}_{\Omega_2, \tau}^1$ calculada a través de (3.15) es $97.58 \mu\text{gm}^{-3}$, y puesto que el resultado no es satisfactorio (es superior a lo establecido por J_1), se aplicó el método de control óptimo descrito en el capítulo 4, es decir, resolvemos el problema de programación lineal (4.5). Para ello, las

soluciones del modelo adjunto $g_i = g_1(r_i, t)$ son calculadas (ver Fig. 5.2), y los coeficientes de costo, en diferentes casos, son considerados en la Tabla 5.1.

Tabla 5.1. Soluciones para la estrategia de control óptimo

i	c_i	λ_i								
1	1	1	1	0.0072	3	1	3	1	3	1
2	1	1	1	1	1	0	1	0.9785	1	0.4825
3	1	1	1	1	1	0.9785	1	0	1	0.4825
4	1	0.6131	3	1	3	1	3	1	3	1

La tabla 5.1 resume las constantes de amortiguamiento óptimas para cada fuente en cinco situaciones diferentes. Si todas las fuentes tienen el mismo coeficiente de costo (ver la segunda columna de la tabla), entonces la fuente situada en el sitio r_4 es la única que debe disminuir sus emisiones en 39 % (tercera columna) con el fin de cumplir con J_1 , lo cual es natural, ya que es la fuente más cercana a la zona de control Ω_2 . Sin embargo, si esta fuente tiene un coeficiente de costo tres veces mayor (cuarta columna), entonces la fuente localizada en r_1 debe detener totalmente su actividad (quinta columna), tal resultado se obtiene debido a que la función objetivo minimiza el costo global. Por el contrario, cuando $c_1 = c_4 = 3$ y $c_2 = c_3 = 1$ (véase la columna sexta), entonces el problema de programación lineal tiene muchas soluciones (ver las columnas 7 y 9 de la tabla). En este caso, el promedio de ambas soluciones determina una solución más balanceada (columna once). Esta solución requiere que sólo las fuentes situadas en r_2 y r_3 reduzcan sus emisiones en 52 % con el fin de cumplir con $\mathbf{J}_{\Omega, \tau}^1 = 80 \mu\text{gm}^{-3}$. Observamos que todos los ejemplos anteriores usan $v_1 = J_1$, ya que la distribución inicial de SO_2 no tiene impacto en la zona de control Ω_2 durante el intervalo de tiempo $(T - \tau, T)$.

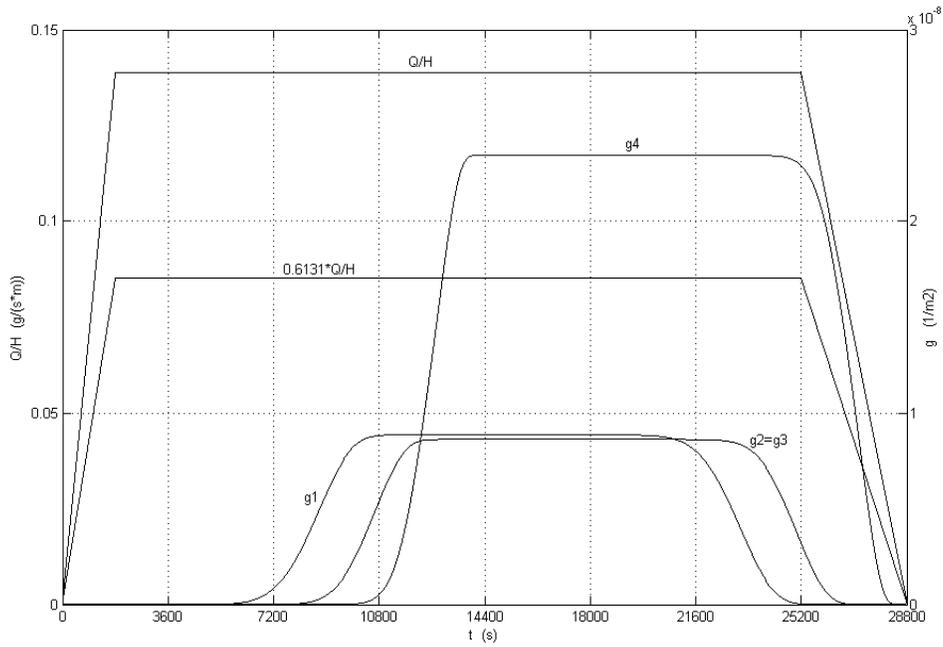


Fig. 5.2. Comportamiento temporal de las funciones adjuntas y comportamiento de la tasa original y la tasa de emisión óptima

Por último, es interesante observar que el comportamiento temporal de cada tasa de emisión óptima $q_i(t) = \lambda_i Q_i$ es similar a la tasa de emisión original Q_i (ver Fig. 5.2). Este hecho es útil para las fuentes contaminantes, ya que no deben cambiar drásticamente su rutina de trabajo.

Conclusiones

Los actuales avances en la predicción numérica del tiempo a corto plazo y la modelación del transporte de contaminantes, han abierto nuevas expectativas que no sólo son capaces de predecir la concentración de los contaminantes, sino que también, con estas técnicas, se pueden controlar las tasas de emisión de fuentes industriales con el fin de evitar niveles peligrosos de la concentración de la contaminación. Por otro lado, la solución del modelo adjunto sirve como función de influencia que nos ofrece información valiosa sobre el papel que juega cada fuente puntual, permitiéndonos desarrollar estrategias de control de emisiones industriales para resolver el problema inverso, es decir, dada una zona Ω en la cual se está rebasando una norma de calidad del aire, la pregunta es ¿qué industrias deben reducir su actividad industrial y en que porcentaje?, en nuestro caso, se usa la técnica adjunta como auxiliar, con esta aproximación dual (modelo directo y adjunto) es posible obtener estimaciones de la concentración de la contaminación y la influencia que tiene cada industria en la zona de importancia, estas dos estimaciones se complementan entre sí en el control de emisiones industriales. Por otra parte, resulta eficaz y económico el método para un análisis de sensibilidad respecto a la distribución geográfica de las industrias y la distribución inicial de la contaminación.

Como se observa, este trabajo trata de un modelo tridimensional de dispersión de contaminación a corto plazo con fuentes puntuales, en el cual se examina una región limitada donde el modelo adjunto y el principio de dualidad son utilizados para representar el problema de programación lineal para asegurar buenas condiciones en la calidad del aire, de esta forma, se determinan las tasas de emisión óptimas de las fuentes industriales, además de que se muestra la existencia de la solución óptima. Por lo tanto, los resultados numéricos manifiestan la capacidad que tiene el método, el cual es muy interesante, ya que es un método que se puede aplicar tanto en modelos lineales o no lineales, es económico computacionalmente hablando y eficiente en la toma de decisiones a corto plazo.

Por otro lado, la integración detallada de técnicas de modelación y de optimización que se muestran en este trabajo dan pauta para que se siga trabajando con modelos más complejos (lineales o no lineales) y que integren por ejemplo reactividad de segundo orden, haciendo el problema más real, además del planteamiento para su aplicación a una situación real.

Otro aspecto importante es el hecho de que al trabajar con modelos más completos o que se aproximen más a la realidad y que demuestren cierto grado de confiabilidad, el introducirle un esquema como el mostrado en este trabajo, podría ser de gran importancia ya que no sólo se actuaría cuando el problema se haya agravado si no que también se podrían disminuir las emisiones desde antes de que se presente un evento extremo de contaminación atmosférica.

Referencias

Ahrens C. Donald, *Meteorology Today, An Introduction to Weather, Climate, and the Environment*, Thomson Higher Education, 585pp., 2006.

Bazaraa, M. S., J. J. Jarvis and H. D. Sherali, *Linear programming and network flow*. John Wiley, 2009.

Beilke, S. and A. J. Elshout, *Acid deposition*. Proceeding of the CEC Workshop, D. Reidel Publishing Company, 1983.

Bell, M. L., Ozone and short-term mortality in 95 US urban communities, 1987-2000. *Journal of the American Medical Association*, Vol. 292, No. 19, 2372-2378, 2004.

Bravo, A. H., R. Sosa y R. Torres, Ozono y lluvia ácida en la Ciudad de México. *Ciencias*. No. 22, 1991.

Caselli, M., *La contaminación atmosférica*. Siglo Veintiuno, México, pp. 190, 1996.

Cheng, S., J. Li, B. Feng, Y. Jin and R. Hao, A Gaussian-box modeling approach for urban air quality management in a northern Chinese city – II. Pollutant emission abatement. *Water, Air, and Soil Pollution*, Kluwer, 178, 15-36, 2007.

Cicero, F. P., V. Torres, A. Rosales, H. Cesar, K. Dorland, R. Muñoz, R. Uribe and A. P. Martinez, Evaluation of human exposure to ambient PM10 in the metropolitan area of Mexico city using a Gis-based methodology. *Journal of the Air & Waste Management Association*. 51, 1586-1593, 2001.

Cooper, W. W., H. Hemphill, Z. Huang, S. Li, V. Lelas and D. W. Sullivan, Survey of mathematical programming models in air pollution management. *European Journal of Operational Research*, Elsevier, 96, No. 1, 1-35, 1996.

Crack, J. and P. Nicolson, A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 43, 50-67, 1947.

Dantzig, G. B., A Orden and P. Wolfe. Generalized simplex method for minimizing a linear form under linear inequality constraints. *Pacific Journal Math*. 5, 183-195, 1955.

Doménech, X., *Química de la contaminación*. Miraguano Ediciones, España, pp. 158, 1999.

Flagan, R. C. and J. H. Seinfeld, *Fundamentals of air pollution engineering*. Prentice-Hall, 1988.

GDF SMA, *Gestión ambiental del aire: Avances y propuestas 2000-2006*. Gobierno del Distrito Federal, Secretaría del Medio Ambiente, Reporte, 2006.

Greenberg, H. J., Mathematical programming models for environmental quality control. *Operations Research*, 43, No. 4, 578-623, 1995.

Hadamard. J., *Lectures on Cauchy's problem in linear partial differential equations*. Dover Publications, 1923.

Hinze, M., N. Yan, and Z. Zhou, Variational discretization for optimal control governed by convection dominated diffusion equation. *Journal of Computational Mathematics*, 27, No. 2, 237-253, 2009.

Kawada, J., Health effects of air pollutants and their management. *Atmos. Environm.*, Vol. 18, No. 3, 613-620, 1984.

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

Lester, P. F., *Aviation Weather*. Jeppesen, 3rd Edition, 2007.

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

Luenberger, D. G., *Linear and nonlinear programming*. Addison-Wesley, 1984.

Marchuck, G. I., *Adjoint equations and analysis of complex system*. Kluwer, Dordrecht, 1995.

Marchuck, G. I., *Mathematical models in environmental problems*. Elsevier, New York, 1986.

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

Mehrotra, S., On the implementation of a primal-dual interior point method. *SIAM Journal on Optimization*, 2, 575-601, 1992.

Panos, G. and Seinfeld J. H., Mathematical modeling of turbulent reacting plumes I: General theory and model formulation. *Atmospheric Environment*, Vol. 20, No. 9, 1971-1807, 1986.

Parra-Guevara, D., Yu. N. Skiba and A. Pérez-Sesma, A linear programming model for controlling air pollution. *International Journal of Applied Mathematics*, Academic Publications, Bulgaria (accepted), 2010.

Parra-Guevara, D. and Yu. N. Skiba. A variational model for the remediation of aquatic system polluted by biofilms. *International Journal of Applied Mathematics*. 20, No. 7, 1005-1026, 2007.

Parra-Guevara, D. and Yu. N. Skiba. On optimal solution of an inverse air pollution problem: Theory and numerical approach. *Mathematical and Computer Modelling*. Elsevier, 43, No. 7-8, 766-778, 2006.

Parra-Guevara, D. and Yu. N. Skiba, Elements of the mathematical modelling in the control of pollutants emissions. *Ecological Modelling* 167, No. 3, 263-275, 2003.

Penenko, V. V. and V. F. Raputa, Some models for optimizing the operation of the atmospheric-pollution sources. *Sov. Meteorol. Hydrology*, 2, 46-54, 1983.

Pope, C. A. and D. W. Dockery, Health effects of fine particulate air pollution: Lines that connect. *J. Air and Waste Manag. Assoc.*, 56, 709-742, 2006.

Riveros G. Hector, et. al. *Origen de los hidrocarburos en la Atmósfera de la Ciudad de México*. Calidad Ambiental Vol. 1 No. 9 15-17, 1994.

Rodhe H., P. Crutzen and A. Vanderpol, Formation of sulfuric and nitric acid in the atmosphere during long-range transport. *Tellus*, 33, 132-141, 1981.

SARH SMN, *Compendio de Apuntes Para la Formación del Personal Meteorológico de la Clase IV* Secretaría de Agricultura y Recursos Hidráulicos, Servicio Meteorológico Nacional, Meteorología Volumen 3, 1978.

Sediña N. Irene, Pérez M. Vicente, *Fundamentos de Meteorología*, Univ Santiago de Compostela, 194pp., 2006.

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

Shir, C. C. and L. J. Shieh, *A generalized urban air pollution model and its applications to the study of SO₂ distributions in the St. Louis metropolitan area*. Journal of Applied Meteorology, Vol. 13, No 2, 1974.

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

Skiba, Yu. N., D. Parra-Guevara and V. D. Belitskaya, Air quality assessment and control of emission rates. *Env. Monitoring and Assessment*, Springer, 111, 89-112, 2005.

Skiba, Yu. N., On a method of detecting the industrial plants which violate prescribed emission rates. *Ecological Modelling*, 159, No. 2-3, 125-132, 2003.

Skiba, Yu. N. and D. Parra-Guevara, Industrial Pollution Transport. Part I: Formulation of the Problem and air pollution estimates. *Env. Modeling and Assessment*, 5, No. 3, 169-175, 2000.

Skiba, Yu. N., Air pollution estimates. *World Resource Review*, 9, No. 4, 542-556, 1997.

Skiba, Yu. N., Balanced and absolutely stable implicit schemes for the main and adjoint pollutant transport equations in limited area. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 9, No. 2, 39-51, 1993.

US EPA, *Integrated science assessment for particulate matter, first external review draft*. U. S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC: Office of Research and Development; report no. EPA-600/R-08/139, 2008.

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

Wark, K. y Warner, C. F. *Contaminación del aire. Origen y control*. Limusa-Noriega Editores, 650 pp., 1996.

Whiteman C. David, *Mountain Meteorology: Fundamentals and Applications* Oxford. University Press US, 355pp., 2000.

Yan, N. and Z. Zhou, A priori and a posteriori error analysis of edge stabilization Galerkin method for the optimal control problem governed by convection-dominated diffusion equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Elsevier, 223, No. 1, 198-217, 2009.

Zhang Y., Solving large-scale linear programs by interior-point methods under the MATLAB *environment*. technical Report TR96-01, Department of Mathematics and Statistics, University of Maryland, 1995.