



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Difusión y adsorción de contaminantes en ciudades: en la  
planeación de ciclovías

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A :

ABRAHAM NAVA MIRELES

TUTOR

DR. RICARDO ATAHUALPA SOLÓRZANO KRAEMER

Ciudad Universitaria, CD. MX., 2020





Universidad Nacional  
Autónoma de México



**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.



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

## Difusión y adsorción de contaminantes en ciudades: en la planeación de ciclovías

Autor: Abraham Nava Mireles  
Asesor: Dr. Ricardo Atahualpa Solórzano Kraemer  
Año: 2020  
Lugar: Ciudad Universitaria, CD. MX.



## Agradecimientos

A mis padres, hermanos, amigos y demás personas, por su confianza y apoyo incondicional a lo largo de mi camino.

A la institución por todas las oportunidades brindadas. A mis profesores que me formaron, particularmente a mi asesor Ricardo Atahualpa.

Este trabajo es una investigación realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM IA106618. Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca recibida.

## Miembros del jurado

Dr. Carlos Málaga Iguñiz  
Facultad de Ciencias

Dr. Denis Pierre Boyer  
Instituto de Física

Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez  
Instituto de Física

Dr. Luis Benet Fernández  
Instituto de Ciencias Físicas

Dr. Ricardo Atahualpa Solórzano Kraemer  
Facultad de Ciencias

# Definiciones

Entropía,  $S$

Constante de Boltzmann,  $k_B$

Potencial químico,  $\mu$

Beta termodinámica,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$

Factor de Boltzmann,  $\zeta = e^{\beta \epsilon}$

Función de partición,  $Z$

Energía libre de Helmholtz,  $F$

Fracción de ocupación (Langmuir),  $f$

Derivada parcial,  $u_x = \frac{\partial u}{\partial x}$

Operador Laplaciano,  $\Delta$

Coefficiente de difusión,  $D = \frac{k_B T}{6\pi a \eta}$

Nodo  $i, j$  en  $t = n + 1$ ,  $u_{i,j}^{n+1}$

Tiempo de equilibrio,  $t_e$

Coefficiente de Reflexión,  $R$

# Contents

<b>Agradecimientos</b>	<b>ii</b>
<b>Miembros del jurado</b>	<b>iii</b>
<b>Definiciones</b>	<b>iv</b>
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
1.1 Plan Bici CDMX . . . . .	3
1.1.1 Diagnóstico . . . . .	3
1.2 Proyecto de mejoramiento . . . . .	5
<b>2 Termodinámica de contaminantes</b>	<b>9</b>
2.1 Mecánica Estadística . . . . .	9
2.2 Modelo de adsorción de Langmuir . . . . .	11
2.3 Humedad . . . . .	13
<b>3 Transporte de contaminantes</b>	<b>15</b>
3.1 Ecuación de difusión . . . . .	15
3.1.1 Problema bien planteado 1D . . . . .	17
3.1.2 Unicidad . . . . .	18
3.1.3 Estabilidad . . . . .	19
3.1.4 Solución Fundamental . . . . .	21
3.2 Movimiento Browniano . . . . .	22
3.2.1 Ecuación de Langevin . . . . .	23
3.2.2 Partícula Browniana libre y la relación de Einstein-Stokes . . . . .	25
3.2.3 Ecuación de Langevin con campo gravitatorio dentro de un medio . . . . .	27
<b>4 Métodos numéricos</b>	<b>28</b>
4.1 Introducción Ecuaciones Diferenciales Parciales . . . . .	28
4.2 Problemas Bien Planteados . . . . .	29
4.3 Condiciones de frontera . . . . .	30
4.4 Método de Diferencias Finitas . . . . .	32
4.5 Diferencias Finitas para Difusión . . . . .	35
<b>5 Implementación del método</b>	<b>38</b>
5.1 Descripción del espacio discreto . . . . .	38

*Contents*

5.2	Cálculo de $u_{ij}^{n+1}$ . . . . .	39
5.3	Fuentes de contaminantes . . . . .	41
5.4	Implementación . . . . .	43
<b>6</b>	<b>Resultados</b>	<b>45</b>
6.1	Estado inicial aleatorio . . . . .	45
6.2	Obstáculos aleatorios con una fuente móvil . . . . .	46
6.3	Flujo en una red de calles . . . . .	49
6.4	Adsorción de Langmuir . . . . .	52
<b>7</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>58</b>
	<b>Lista de Figuras</b>	<b>61</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>63</b>

# 1 | Introducción

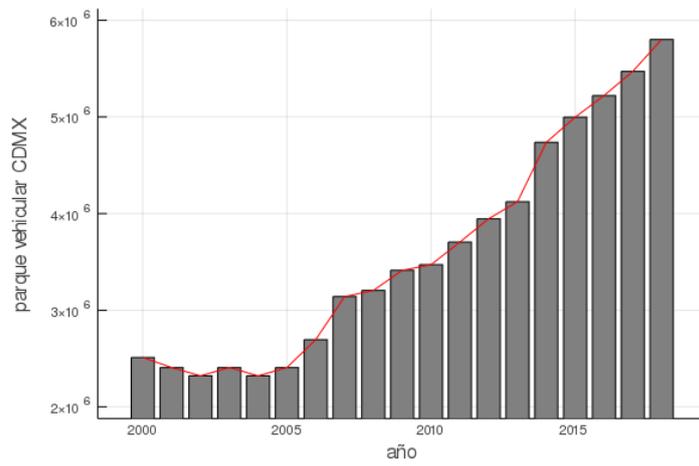
En una ciudad tan poblada como la Ciudad de México, la movilidad es un tema de interés para los habitantes, gobierno, investigadores, empresarios, entre otros, ya que contribuye a la calidad de vida de los habitantes, a la dinámica social y económica de la ciudad.

El crecimiento de la población de la Ciudad de México ha sido mucho menor a partir del 2008 (comparado con las décadas anteriores). La población se ha mantenido dentro del rango de 8.2 y 8.85 millones de habitantes. En cuanto a la zona metropolitana del Valle de México la población se mantuvo entre 19.2 y 21.3 millones de habitantes (según cifras del Instituto Nacional de Estadística y Geografía INEGI) [1]. Sin embargo la movilidad ha sido afectada significativamente, siendo el aumento del parque vehicular y el patrón de crecimiento expansivo territorial las principales causas (ver Fig. 1.1), pasando de 3.2 millones de autos en 2008 a 5.8 millones en 2018 [2]; por tanto al finalizar 2018 la ciudad contaba con 65 autos por cada 100 habitantes.

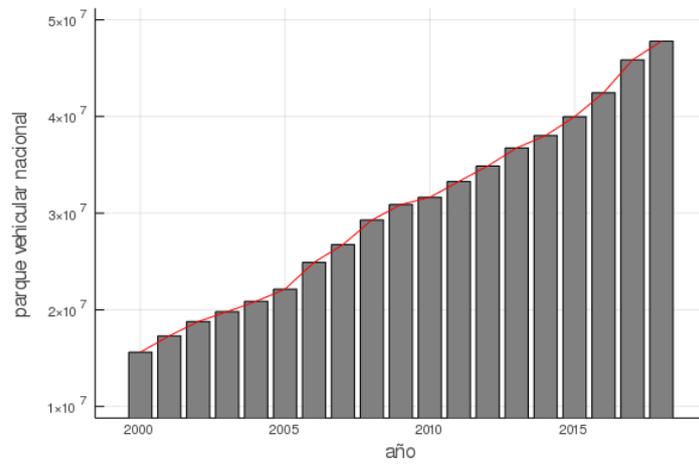
De acuerdo a TomTom Traffic Index, la Ciudad de México se ha mantenido dentro del grupo de ciudades más congestionadas en los últimos años. En 2015 , 2016 y 2017 se encontraba en el primer lugar con promedios anuales de porcentajes de congestión de 59%, 66% y 66% respectivamente y en 2018 pasó al lugar 9 de la lista con un 52%. Dicho porcentaje señala el tiempo extra de viaje al que se tendría sin congestión; esta base es determinada por recorridos reales [3]. Además, de acuerdo a un estudio de "Sin Tráfico" realizado en 2016-2017, el promedio de velocidad en CDMX es de 13.42 km/hr, mismo tema del que algunos periódicos han hablado [4] [5].

El congestionamiento de la ciudad naturalmente provoca: la reducción de la movilidad, el incremento de los tiempos de traslado, el incremento en accidentes de tránsito, los elevados niveles de contaminación y problemas secundarios como el robo en vías. Si bien se han implementado avances, principalmente en transporte público, estos no han sido suficientes. Por lo tanto, es necesario buscar alternativas de movilidad que disminuyan los efectos negativos, que además puedan ser aprovechadas para planificación apropiada en la que se consideren sus ventajas y desventajas.

Una opción, que hasta ahora no ha tenido o llamado la atención suficiente, es la bicicleta. El presente trabajo es parte del proyecto de mejoramiento de planificación de ciclovías dentro



(a)



(b)

Figura 1.1: Parque vehicular del año 2000 a 2018 correspondientes: a) a CDMX y b) al conteo nacional. Creación a partir de datos del INEGI

## 1.1. PLAN BICI CDMX

de la Ciudad de México desarrollado por el Instituto de Geografía UNAM mediante el "Plan Bici CDMX"; no obstante el proyecto de mejoramiento no se limita a la CDMX, si no que los algoritmos desarrollados y parte de los resultados podrán ser implementados en otras ciudades.

### 1.1 Plan Bici CDMX

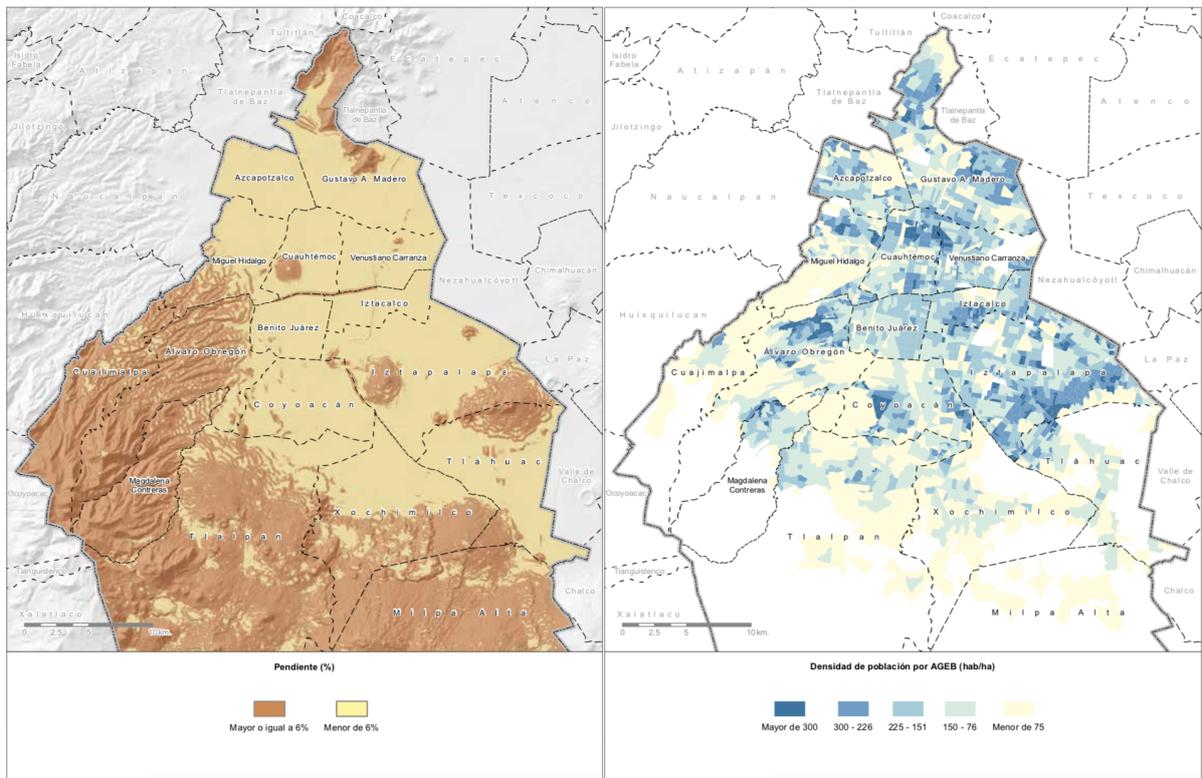
Las ventajas del uso de bicicleta como medio de transporte son innumerables: es una opción de bajo costo, rápida y eficiente a distancias cortas (en la Ciudad de México alrededor del 50% de los viajes son menores a 8 km), además provee beneficios para la salud, contribuye a la mejora de movilidad y reduce la emisión de contaminantes. Sin embargo no siempre tiene la atención necesaria debido a la falta de infraestructura, lo cual representa un riesgo para los usuarios. En esta sección se presenta un análisis que es parte del trabajo desarrollado por el Instituto de Geografía UNAM, bajo el proyecto "Plan Bici CDMX" (PB CDMX), que fue hecho con el propósito de guiar el desarrollo de una nueva infraestructura ciclista en la Ciudad de México con base en un diagnóstico de la ciudad [6].

#### 1.1.1 Diagnóstico

En la ciudad se ha visto un incremento significativo del uso de bicicleta, con un número de viajes registrados en 2017 (de 300,000) tres veces al que se tenía en 2007; además de que las políticas implementadas dentro del gobierno de la ciudad en los últimos años han fomentado y contribuido al aumento de este medio de transporte al considerar que una red de infraestructura ciclista es un punto fundamental para mejorar la problemática de abandono y deterioro del espacio público, (capítulo 2 del PB CMDX).

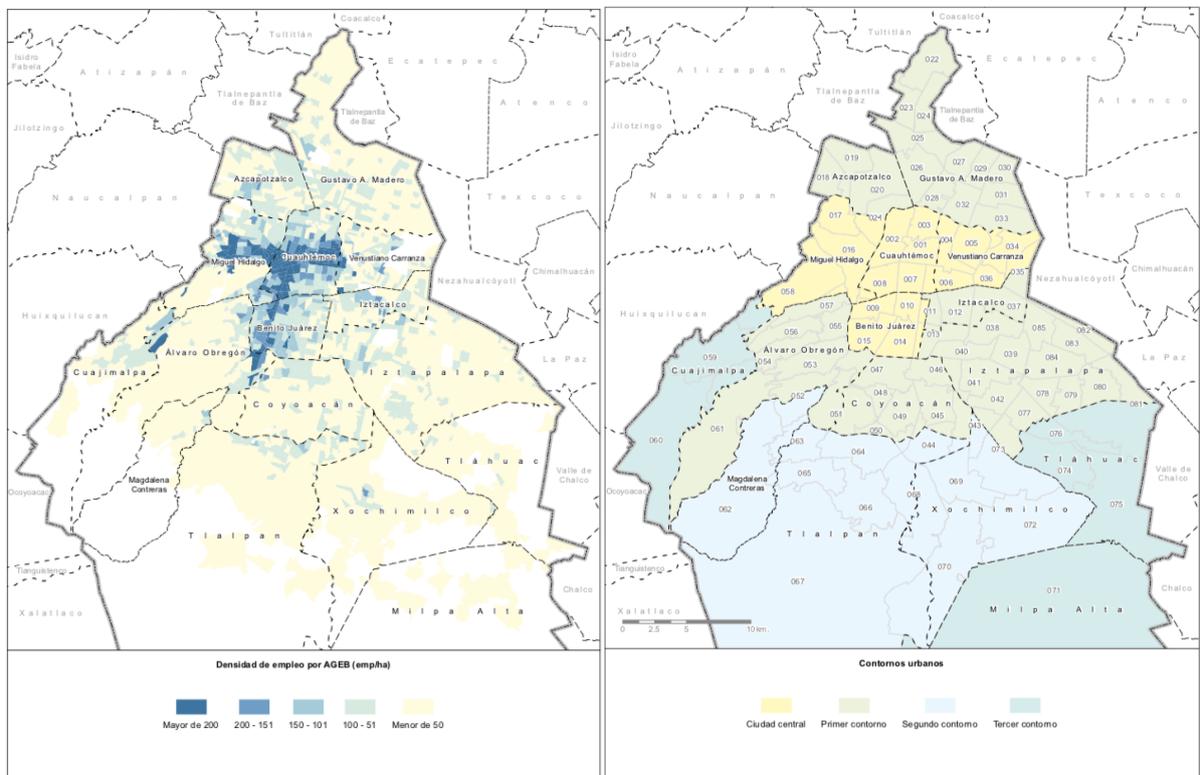
El clima de la ciudad se mantiene en una temperatura templada tal que la media anual es de 15 a 16 °C y en el caso de las lluvias, se presentan en su mayoría en la tarde-noche durante el verano y suelen ser predecibles, lo cual permite que los usuarios decidan realizar viajes en bicicleta durante casi todo el año. El diagnóstico muestra que el número de viajes en bici baja conforme a las temperaturas bajas y precipitaciones. Más aún, el 65% de terreno de la zona urbana de la ciudad tiene pendientes menores a 6%: en la Fig. 1.2 se observa que el área con estas características contiene la mayor parte de empleos y de población. La población en la periferia, que son las de mayor grado de marginación urbana (CONAPO), tienden a trasladarse al centro debido al gran número de empleos que se concentran en dicha zona. Estos son los aspectos más relevantes de la ciudad que favorecen significativamente al uso de la bicicleta en la ciudad.

### 1.1. PLAN BICI CDMX



(a)

(b)



(c)

(d)

Figura 1.2: a) Pendiente del terreno en la CDMX, b) densidad de población por área geoes-tadística básica (AGEB), c) densidad de empleos por AGEB y d) división por distritos de tránsito de la Ciudad de México. (Fuente: PB CDMX).

## 1.2. PROYECTO DE MEJORAMIENTO

Parte de las zonas con alto potencial de uso de bicicleta, como la zona centro, ya cuentan con infraestructura sobre las vías (ciclovías, ciclo-carriles, y carril bus-bici), servicios de bicicletas compartidas (como el proyecto ECOBICI CDMX y otros servicios particulares mediante aplicaciones), así como sus respectivos aparcamientos que en su mayoría coinciden con puntos de conexión con otros medios de transporte, lo cual sugiere que los viajes en bicicleta serían en viajes de corto alcance con la finalidad de transbordar a un transporte de largo alcance. Debido a que la mayor parte de la infraestructura se encuentra dentro del polígono central de la ciudad (corresponde alcaldías Miguel Hidalgo, Cuauhtémoc, Benito Juárez y Venustiano Carranza señalados con los contornos urbanos 001-0017), no se tiene un conocimiento real del potencial que tienen los traslados más largos que consideran los viajes de casa-trabajo; aunque debido a la velocidad promedio de la CDMX sugiere que dichos viajes son de interés alto.

Bajo un análisis del PB CDMX, se muestra que la infraestructura atrae entre 39 y 55% más viajes de lo que se esperaría si no existiera dicha infraestructura. Adicionalmente, alrededor del 18% de los viajes en bici se realizan en vías ciclistas mientras que 48% son sobre el arroyo vehicular. La percepción de los ciclistas es que la inseguridad vial es uno de los factores que más impiden el uso, y se debe principalmente a la falta de infraestructura. La Fig. 1.3 muestra la densidad de accidentes que involucran a ciclistas.

## 1.2 Proyecto de mejoramiento

En el Plan Bici CDMX (PB) se realizó un análisis de redes para encontrar las rutas de traslado más cortas entre pares de contornos urbanos (distritos de tránsito) más cercanos a través de la red primaria de la ciudad (Fig. 1.2-d), se tomaron en cuenta los viajes atraídos por cada uno de los distritos de tránsito, los viajes internos del distrito y los viajes entre un distrito y otro (encuesta origen destino INEGI); el análisis implementado se basa en una regresión logística para calcular la probabilidad de que se realicen los viajes en ciertas vías (primarias). El modelo da información estadística acerca de los usuarios como lo es el sexo, edad y estrato social, lo cual estima a los ciclistas potenciales. Además se propuso la implementación de bici-estacionamientos y la expansión del programa ECOBICI, con la discusión y el análisis individual para reconocer de las características e impacto dentro del plan.

Este modelo matemático ([6] sección 3) determina a los usuarios potenciales y conexiones entre distritos, sin embargo se reconocen aspectos no favorables y en ocasiones inconsistentes con el diagnóstico. Estos aspectos son: se consideran únicamente las vías primarias y los traslados de personas en pares de contornos urbanos (si un individuo se mueve en más de dos contornos urbanos no se considera), en la Fig. 1.3 se observa que la mayoría de los

## 1.2. PROYECTO DE MEJORAMIENTO

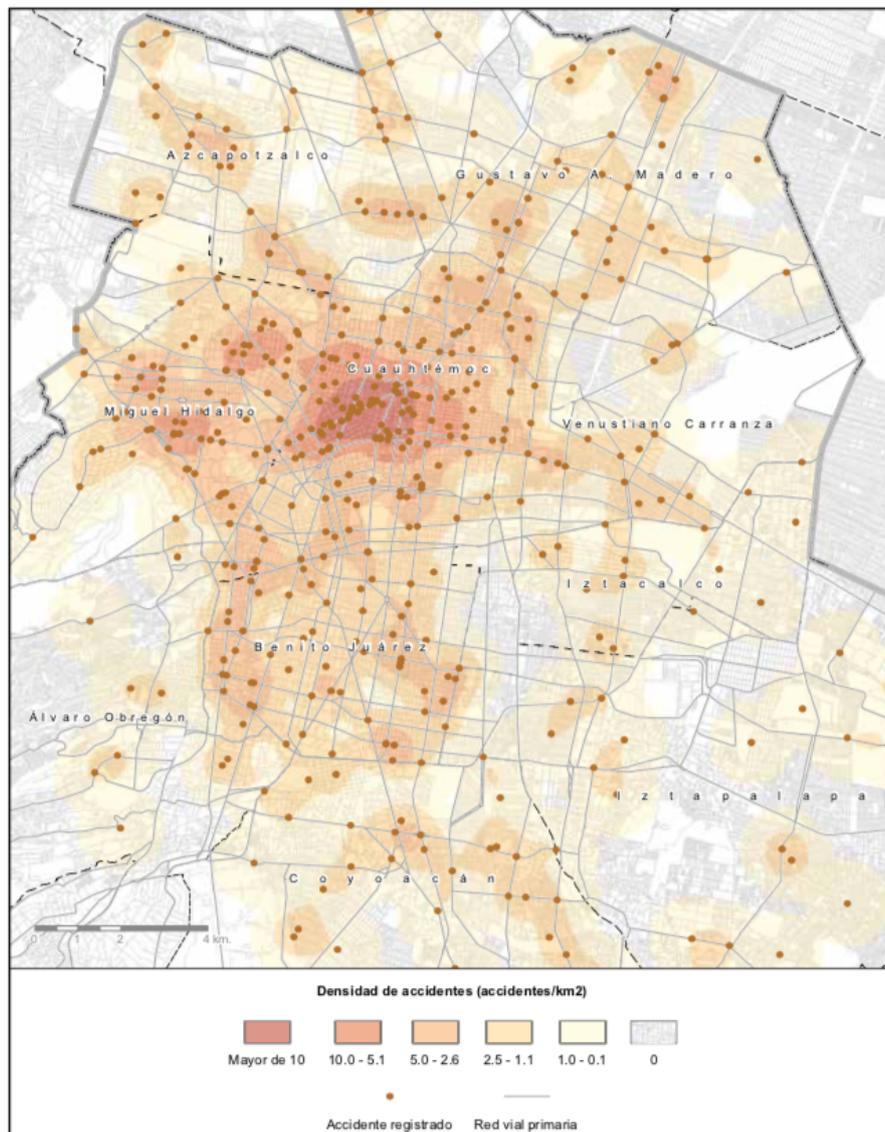


Figura 1.3: Distribución de accidentes con ciclistas en el polígono central de CDMX durante el 2017.

## 1.2. PROYECTO DE MEJORAMIENTO

accidentes para ciclistas ocurren sobre vías principales lo que representa mayor riesgo en estas vías y los efectos negativos a la salud de acuerdo a los niveles de contaminantes que afectan a los usuarios. Por otro lado, tampoco se toman en cuenta ni se analizan los efectos al tránsito, es decir, que tanto aumenta o disminuye el congestionamiento al incluir los tramos de ciclovías.

El proyecto de mejoramiento se fundamenta en los aspectos anteriores y así contar un plan de desarrollo de infraestructura ciclista mejor bajo estos criterios. Dicho proyecto se conforma de tres partes:

1. **Difusión y adsorción de contaminantes.**
2. Simulación del movimiento de los autos en una red de calles.
3. Optimización de los caminos para las ciclovías.

**Esta tesis se limita al desarrollo del primer punto**, se determina la cantidad de contaminantes emitida por los autos en la calles, así como las distribuciones correspondientes debido a los efectos de difusión.

Se consideró un caso simple en el que no se toman en cuenta los flujos de vientos ni como afecta el movimiento de los autos, es decir, los autos son fuentes puntuales. Este modelo es el caso más optimista, del cual sabremos como es la distribución de contaminantes en el mejor de los casos, es decir, no hay perturbaciones en el proceso de difusión. Evidentemente los aspectos no considerados influyen en la difusión y ocasionan que la cantidad de contaminantes sea más homogénea en el espacio; para incluirlos, la ecuación sería modificada por una parte de advección, la cuál ya ha sido estudiada en [7] [8].

Para esto se realizaron simulaciones numéricas con el método de diferencias finitas de la correspondiente ecuación de difusión (2-dimensional). En principio, hay mayor cantidad de contaminantes en las calles más transitadas, sin embargo no se pueden descartar en su totalidad ya que sus características contribuyen para obtener una red de ciclovías más óptima, por ejemplo: la cantidad de carriles, sus conexiones, si están rodeadas de edificios o parques, entre otras. Parte de los objetivos, para obtener criterios aplicables a la planeación de ciclovías, es decir como son las distribuciones (o niveles de contaminantes) debido al flujo de autos considerando distintas características de las calles.

Adicionalmente, mediante el modelo de adsorción sólido-gas de Langmuir se desarrollará un análisis de equilibrio (entre una superficie cristalina y un gas) para distintos contaminantes en la Ciudad de México de acuerdo a los parámetros termodinámicos y, en este caso, meteorológicos involucrados como la presión, la temperatura y la humedad, esto bajo la sospecha

## 1.2. PROYECTO DE MEJORAMIENTO

de que la presión atmosférica en esta ciudad puede influir que exista una disminución en los niveles de contaminantes. En la sección 2.2 se muestra una descripción más detallada del modelo. Adelantamos que las suposiciones consideradas en el modelo de Langmuir (como considerar al sistema en equilibrio lo cual es erróneo), tienen un gran peso en los resultados tanto a favor como en contra.

En el segundo punto, se trabaja en la simulación del movimiento de los autos en una red de calles. El algoritmo se basa en teoría de juegos, en el que cada agente o participante es un automovilista el cual toma las decisiones de la ruta que más le convenga para llegar a su destino dentro de una red de calles. Esta decisión del agente dependerá de su percepción de la ruta que está tomando, es decir, la cantidad de autos que observa en las calles, el tiempo que ha tardado de más en un trayecto, la paciencia, etc. Estos aspectos son determinados por las interacciones entre los agentes, por ejemplo que tan cerca puede estar uno del otro. El objetivo del algoritmo es determinar la dinámica de los autos. Se utilizará el modelo de precio de la anarquía aplicado a una red de nodos [9] [10], que en este caso fungen como las intersecciones de las calles; el modelo determina que tan conveniente es que un agente tome una decisión u otra, debido a sus interacciones con otros agentes, en conjunto los agentes muestran un estado de equilibrio que muestra el estado más probable del sistema, es decir, las rutas más probables que tomarán los agentes en conjunto.

En el tercer punto, se pretende optimizar la red de ciclovías, el objetivo principal es disminuir el largo de las ciclovías, conectando los puntos de interés principales de origen-destino que priorizan a los que tienen mayor conectividad. Se han implementado modelos tipo Ising para el estudio de transición vítrea, lo cuál ha llevado a métodos que minimizan las distancias en una red de nodos. Los modelos Ising son descritos por Hamiltonianos que contienen interacciones entre los nodos (por ejemplo la interacción de espín), de estos se puede derivar la entropía correspondiente, que al maximizarse nos da la red de conexiones mínima en longitud.

Una vez se obtenga una red de caminos para bicis, se realiza nuevamente el análisis del punto uno para observar los efectos de la disminución del espacio de autos para así volver a calcular una nueva red de ciclovías. Esto se realizaría iterativamente hasta obtener la longitud menor tal que el movimiento de los autos es igual o mayor para cualquier red de ciclovías nueva que se forme.

## 2 | Termodinámica de contaminantes

En este capítulo se introducen los conceptos para entender la termodinámica de los contaminantes (que en general se comportan como gases como  $\text{NO}_2$ ,  $\text{O}_3$ , partículas PM, entre otros) desde el punto de vista de mecánica estadística la cual da lugar al modelo de Langmuir. El modelo describe el equilibrio termodinámico entre un gas y un sólido.

### 2.1 Mecánica Estadística

La mecánica estadística o física estadística predice, mediante estadística y probabilidad, propiedades de un sistema macroscópico a partir de las descripciones de los componentes microscópicos que lo conforman, ya sea desde el punto de vista de la física clásica o cuántica. Así para un sistema de  $10^{23}$  partículas en una caja, en lugar de resolver la ecuación para cada partícula y saber qué hace cada una (por ejemplo la ecuación de Schrödinger con las contribuciones de las interacciones con las otras partículas del sistema), es mejor utilizar la herramienta física estadística para saber cómo se comportan en conjunto y hacer preguntas más básicas sobre la caja como su volumen, su temperatura, el cambio debido a las distintas perturbaciones, u otra de las variables termodinámicas que se conocen de la física clásica.

En el formalismo de la mecánica estadística no solo se considera el comportamiento de un solo estado (una partícula), si no se utilizan los ensambles estadísticos, que en general describen la distribución de probabilidad sobre todos los posibles estados del sistema [11][12].

Por ejemplo, el ensamble microcanónico describe un sistema aislado, es decir, no intercambia partículas ni energía con el entorno, por lo tanto su composición y su energía no cambian. En este caso, todos los micro-estados accesibles son igualmente probables ya que son equivalentes entre sí [13]; las variables de este sistema son el número de partículas  $N$ , el volumen  $V$  y la energía  $E$  del sistema. Si  $\Omega(E)$  es el número de estados accesibles del sistema con energía  $E$ , entonces la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado  $|n\rangle$  es:

$$P(|n\rangle) = \frac{1}{\Omega(E)}$$

## 2.1. MECÁNICA ESTADÍSTICA

Ésta distribución de probabilidad es el ensamble microcanónico, del cual se puede derivar la entropía, temperatura y presión como:

$$S(E) = k_B \ln \Omega(E)$$
$$\frac{1}{T} = \left( \frac{\partial S}{\partial E} \right)_{V,N}; \quad p = T \left( \frac{\partial S}{\partial V} \right)_{E,N} \quad (2.1)$$

$k_B \approx 1.38064852 \times 10^{23} \text{ J/K}$  se le conoce como la constante de Boltzmann. Otro término de utilidad es la beta termodinámica dada por  $\beta = \frac{1}{k_B T}$

El ensamble canónico describe un sistema que interactúa con un segundo que tiene la función de reservior de calor, por ejemplo un sistema sujeto a un baño de calor. El sistema puede intercambiar energía con el reservior y este al ser tan variables termodinámicas (como  $V$  o  $T$ ) no cambian; las principales variables termodinámicas del ensamble son  $N, V$  y  $T$ .

El ensamble de nuestro interés es aquel cuya composición del sistema no es fija, lo que podría ocurrir en la interacción entre un gas y un reservorio, entonces la variable  $N$  ya no es fija. En este caso se requiere que el reservior tenga fijo el potencial químico  $\mu$  y su temperatura  $T$ ; por lo tanto no solo se tiene un equilibrio respecto a la temperatura o a la energía, si no también al potencial químico. De la energía libre de Helmholtz  $F = E - TS$ , se puede obtener el potencial químico

$$\mu = \left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = \left( \frac{\partial E}{\partial N} \right)_{S,V}. \quad (2.2)$$

Con las variables termodinámicas principales del sistema  $\mu, V$  y  $T$  se puede deducir de 2.1 y 2.2 que:

$$dE = TdS - pdV + \mu dN$$

observemos que el potencial químico es el costo de energía para añadir una partícula a un sistema para  $S$  y  $V$  dados.

La distribución de probabilidad corresponde al ensamble gran canónico. La probabilidad de encontrar el sistema en un estado  $|n\rangle$  ( $p(n)$ ) dependerá de la energía  $E_n$  y del número de partículas  $N_n$ . Cada ensamble tiene su correspondiente función de partición; la función de partición del gran canónico esta dada por:

## 2.2. MODELO DE ADSORCIÓN DE LANGMUIR

$$Z(T, \mu, V) = \sum_n e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}$$

y

$$p(n) = \frac{e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}}{Z}.$$

Notemos que la información termodinámica esta contenida en  $Z$ . Se puede obtener el valor promedio del número de partículas  $\langle N \rangle$  y las fluctuaciones:

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z; \quad \Delta N^2 = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu}. \quad (2.3)$$

Finalmente se define el gran potencial termodinámico:

$$\Phi = -k_B T \ln Z \quad (2.4)$$

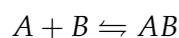
del cual se derivan las variables  $S$ ,  $P$  y  $N$  respecto a  $T$ ,  $V$  y  $\mu$  de acuerdo a las variaciones de  $\Phi = \Phi(T, V, \mu)$

$$d\Phi = -SdT - pdV - Nd\mu.$$

## 2.2 Modelo de adsorción de Langmuir

En 1916 Irving Langmuir desarrolla el modelo que describe la adsorción de un gas por la superficie de un sólido publicado dos años adelante [14]; en 1932 le otorgaron el Premio Nobel de Química. La interacción de un cristal y un gas está presente en distintos fenómenos como la ionización atómica en un semiconductor. Sin embargo, el modelo ha funcionado para materiales no cristalinos como en la adsorción de  $O_2$  por la mioglobina (que es una proteína). En nuestro caso se tiene la hipótesis de que existe la adsorción de contaminantes sobre vapor de agua de acuerdo a la humedad en los alrededores [15].

La reacción química correspondiente es:



## 2.2. MODELO DE ADSORCIÓN DE LANGMUIR

en la cual las moléculas de tipo A se encuentran en equilibrio con las de tipo B. Tomando en cuenta distintas suposiciones: el sólido B cuenta con una superficie plana y homogénea, la cual posee espacios adsorbentes libres siendo todos estos equivalentes y cada sitio puede adsorber a lo más una molécula del tipo A; el gas se comporta como ideal en condiciones isotérmicas [16].

La función de partición del gran ensemble canónico correspondiente es:

$$Z = \sum_{N_a}^{N_s} e^{\beta N_a \mu_A} z_c$$

donde  $N_a$  es el número de moléculas adsorbidas,  $N_s$  el número de sitios de la superficie adsorbente y  $z_c$  la función de partición del ensemble canónico:

$$z_c = \frac{\zeta}{N_a!} \frac{N_s!}{(N_s - N_a)!}$$

$\zeta$  es la función de partición de una molécula individual de A, es decir, el factor de Boltzmann dado por  $\zeta = e^{\beta \epsilon}$  y  $\epsilon$  es la energía de una molécula de gas adsorbida. La suma se reduce a:

$$Z = (1 + \zeta e^{\beta \mu_A})^{N_s}$$

por lo tanto el potencial de gran canónico es:

$$\Phi = -k_B T \ln Z = -k_B T N_s \ln(1 + \zeta e^{\beta \mu_A})$$

de 2.3 la fracción de ocupación  $f$  está dada por:

$$f = \frac{\langle N_a \rangle}{N_s} = \frac{\zeta e^{\beta \mu_A}}{1 + \zeta e^{\beta \mu_A}}. \quad (2.5)$$

Ahora consideramos la **condición de equilibrio químico**  $\mu_A = \mu_B$ , siendo  $\mu_A$  y  $\mu_B$  el potencial químico del gas A y del sólido B respectivamente.

La función de partición para un gas ideal es:

$$Z_g = \frac{V^N n_Q^N}{N!}; \quad n_Q = \left[ \frac{mk_B T}{2\pi\hbar} \right]^{3/2}$$

### 2.3. HUMEDAD

$n_Q$  es conocido como la concentración cuántica que es el número de partículas por unidad de volumen en un sistema cuya distancia entre partículas es igual a la longitud de onda de de Broglie  $\lambda$ , para concentraciones mayores o iguales los efectos cuánticos son apreciables.

De acuerdo a (2.2) con  $F = -k_B T \ln Z_g$  correspondiente a la energía libre de Helmholtz se obtiene  $\mu_A = -k_B T \ln(Vn_Q/N)$ . Finalmente sustituyendo  $\mu$  y de la identidad  $pV = Nk_B T$  en 2.5 se obtiene:

$$f = \frac{p}{p + p_0} \quad (2.6)$$

$p$  es la presión del gas A que es la misma que ejerce el gas sobre la superficie del sólido.  $p_0$  se define como:

$$p_0 = k_B T n_Q e^{\epsilon/k_B T}.$$

Tomando el modelo de Langmuir, los contaminantes tomarán el rol de un gas y pueden ser descritos por la termodinámica del modelo, además de saber las variables termodinámicas: la presión atmosférica que corresponde a la presión del gas, la temperatura, los potenciales químicos de cada contaminante. Al igual, se pueden determinar otros parámetros como la humedad que determina la cantidad de agua en el ambiente y este mismo funge como la superficie sólida adsorbente, así como el tamaño de las moléculas que es necesario para obtener el valor de  $n_Q$ .

La física estadística se encuentra intrínsecamente relacionada con la termodinámica, ya se ha mostrado en el modelo de Langmuir; en el siguiente capítulo abordaremos el fenómeno de difusión que igualmente esta relacionado con la mecánica estadística y termodinámica.

## 2.3 Humedad

Dada la suposición de que el agua en forma de gotas en el aire simula una superficie de adsorción para los contaminantes, así como superficie cristalina para los gases en el modelo de Langmuir, introducimos los conceptos relacionados con la humedad que nos permiten dar un estimado de la cantidad de agua en el ambiente misma que se usa en el análisis.

En la mayoría de los casos, los datos que se registran de la humedad están dados en términos de la humedad relativa ( $H_R$ ) que indica el porcentaje de saturación del aire a una temperatura dada, es decir, la cantidad de vapor de agua presente en el aire comparada con la

### 2.3. HUMEDAD

que el aire puede retener a cierta temperatura, cuando el aire ya no puede retener más vapor entonces este último se condensa. Se puede representar en términos de la densidad actual de vapor también llamada humedad absoluta ( $H_a$ ) y la densidad de saturación de vapor ( $\rho_s$ ) y en términos de la presión parcial del vapor ( $p_p$ ) y la presión de saturación del vapor ( $p_s$ ) [17]:

$$H_R = 100\% \frac{H_a}{\rho_s} = 100\% \frac{p_p}{p_s}.$$

Entre las temperaturas 0 y 40 C se tiene una relación empírica para  $\rho_s$  en función de la temperatura  $T$  [18]:

$$\rho_s = 5.018 + 0.32321T + 8.1847 \times 10^{-3}T^2 + 3.1243 \times 10^{-4}T^3.$$

Ahora nos interesa conocer la cantidad de agua en estado líquido en el ambiente, en el equilibrio (cuando un material no gana ni pierde humedad) esta cantidad está dada de forma similar al contenido de humedad en equilibrio [19], que indica la cantidad de agua (en porcentaje de  $H_R$ ) que puede estar contenida en cualquier material, en este caso queremos saber la humedad contenida en el aire mismo. La relación es empírica y no se conoce, sin embargo considerando a  $H_R$  y  $H_a$  se puede aproximar linealmente a la cantidad de agua en estado líquido en el aire como:

$$C_{H_2O} = \alpha \frac{H_R}{100\%} * H_a = \alpha \frac{H_R^2 \rho_s}{100\%^2} \quad (2.7)$$

donde  $\alpha$  es una constante de proporcionalidad. El término  $\alpha \frac{H_R}{100}\%$  corresponde al porcentaje de agua que contiene el aire respecto a la humedad relativa, que al multiplicar por la humedad absoluta nos da el estimado de la cantidad de agua contenido en el aire. Para este trabajo consideraremos que  $\alpha = 1$

## 3 | Transporte de contaminantes

El estudio del transporte o difusión de contaminantes es esencial para determinar qué proporción de lo que respiramos contiene partículas tóxicas. Para poder estimar la cantidad de contaminantes producidos por un automóvil llega a un individuo situado a una determinada distancia del emisor, necesitamos estudiar su propagación a partir de la ecuación de difusión, la cuál es una ecuación diferencial parcial que describe la distribución de contaminantes como función del tiempo.

### 3.1 Ecuación de difusión

La ecuación de difusión puede ser derivada a través de las leyes de conservación de masa y la ecuación de continuidad, así como la ley de Fick.

Se considera un medio homogéneo e isotópico si tiene una densidad de masa constante  $\rho$ . Denotamos con  $f = f(\mathbf{x}, t)$  la tasa por unidad de masa de una fuente externa, donde  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ ,  $t$  es la variable de tiempo; la función  $f$  describe la distribución de fuentes o sumideros dentro del dominio de  $u$ ; si  $f < 0$  describe un sumidero y  $f > 0$  una fuente. Se considera a  $u = u(\mathbf{x}, t)$  la concentración de soluto (contaminante) por unidad de masa y a  $\mathbf{q}$  el vector que especifica el flujo de contaminantes en magnitud y dirección a través de una unidad de área (o simplemente vector de flujo).

De acuerdo a la *ley de conservación de masa*, en un espacio arbitrario  $\Omega$  (dominio de  $u$ ), la tasa de cambio del soluto en  $\Omega$  es igual al flujo neto a través de la frontera  $\partial\Omega$  más la tasa a la cual una fuente suministra el soluto:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u \rho dV = - \int_{\partial\Omega} \rho \mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{n}} d\sigma + \int_{\Omega} f \rho dV.$$

Del teorema de la divergencia y a que  $\Omega$  es arbitrario, se obtiene:

$$u_t = -\nabla \cdot \mathbf{q} + f \tag{3.1}$$

### 3.1. ECUACIÓN DE DIFUSIÓN

donde  $u_t$  denota la derivada parcial de  $u$  respecto a  $t$  y  $\Delta$  es el operador laplaciano. (3.1) es la ecuación de continuidad que en este caso expresa la conservación de masa, que describe el transporte de una cantidad conservada como la masa, la energía, el momento, la carga eléctrica, entre otras. Gran variedad de fenómenos físicos pueden ser descritos por esta ecuación.

Por otro lado la ley de Fick describe el fenómeno de difusión, relacionando el flujo de un soluto con la rapidez de su difusión. Postula que el flujo va de las regiones de mayor concentración a las de menor concentración a través de un gradiente de concentración. (ec. 3.2)

$$\mathbf{q} = -D\nabla u \quad (3.2)$$

donde  $D > 0$ , es el coeficiente de difusión, una constante de proporcionalidad entre el gradiente de concentraciones y el flujo que determina que tan rápido cambia  $u$  en el tiempo. De las ecuaciones (3.1) y (3.2) se obtiene la ecuación de difusión no homogénea (3.3).

$$u_t - D\Delta u = f. \quad (3.3)$$

Notemos que la ec. (3.3) puede ser escrita de la forma  $u_t + Lu = f$  (con  $L$  un operador lineal), que describe a las ecuaciones diferenciales parciales del tipo parabólicas.

Dado que los valores de  $u$  dan cuenta de la concentración de una sustancia  $(\mathbf{x}, t)$ , entonces la cantidad

$$\int_{\Omega} u(\mathbf{x}, t) dV$$

es la masa total dentro del dominio  $\Omega$  a tiempo  $t$ . Cuando  $f = 0$  entonces esta cantidad se conserva.

Ya que el Movimiento Browniano puede describir el comportamiento de partículas difusivas (debido a la colisión molecular), a la difusión se le asocian los mismos fenómenos como la difusión de contaminantes.

Los problemas típicos de difusión presentan cambios rápidos al inicio en los valores de  $u$ , pero su evolución es cada vez más lenta, después de "algún tiempo" no se puede apreciar las diferencia (lo explicaremos más adelante a partir de la solución fundamental (3.6)). Por lo anterior se dice que la ecuación converge a un estado estacionario  $\bar{u}(\mathbf{x})$  cuando  $t \rightarrow \infty$ ; en el

### 3.1. ECUACIÓN DE DIFUSIÓN

límite  $u_t = 0$  implica que

$$D\Delta u(\mathbf{x}) = f$$

que es la ecuación de Poisson.

#### 3.1.1 Problema bien planteado 1D

En este trabajo utilizaremos los conceptos de problemas bien planteados aplicados a EDP lineales. Para obtener un problema bien planteado (o problema bien definido) es necesario encontrar la solución única cuyo comportamiento dependa continuamente de los datos del problema, por ejemplo: las condiciones iniciales y las condiciones de frontera.

Un problema típico es la evolución de la temperatura  $u$  dentro de una barra cilíndrica. La ecuación de difusión en una dimensión puede describir este fenómeno, al suponer que  $L \gg A$ , con  $L$  el largo de la barra y  $A$  el área de la sección transversal. Así aunque el problema es 3-dimensional se aproxima el problema a una dimensión en el que la difusión únicamente se da a lo largo del cilindro.

En 1D la ecuación de difusión es de la forma:

$$u_t - Du_{xx} = f.$$

Al estudiar la evolución de  $u$  dentro en un intervalo de tiempo, digamos  $t \in [0, T]$ , dentro de un dominio  $\Omega = [0, L]$ , es necesario definir un estado inicial

$$u(x, t = 0) = g(x)$$

y la interacción con los alrededores, a menos que el dominio  $\Omega$  cubra todo el espacio. Estas interacciones las determinan las condiciones de frontera, que describen la temperatura a la que se encuentran los alrededores (Dirichlet) y cómo es el flujo a través de las fronteras (Neumann) o una combinación de éstas (ver sección 4.3). Naturalmente  $g(x)$  debe satisfacer estas condiciones.

En resumen, se busca determinar  $u(x, t)$  tal que:

$$\begin{cases} u_t - Du_{xx} = f & 0 < t < T, \quad 0 < x < L \\ u(x, 0) = g(x) & 0 \leq x \leq L \\ \text{Condiciones de frontera} & 0 < t \leq T \end{cases}$$

esto se generaliza de forma inmediata a  $R^n$ .

### 3.1. ECUACIÓN DE DIFUSIÓN

#### 3.1.2 Unicidad

Supongamos que  $u$  y  $v$  son soluciones a un problema de difusión (lineal) sujeto a condiciones iniciales y de frontera, entonces  $w = u - v$  también es solución. Para probar que la solución es única, debemos mostrar que  $w = 0$  [20].

Dado que  $u$  y  $v$  son solución a la ecuación no homogénea, se observa que  $w$  es solución a la ecuación homogénea

$$w_t - D\Delta w = 0$$

en  $Q_T = \Omega \times (0, T)$  (Fig. 3.1), con la condición inicial  $w(\mathbf{x}, 0) = 0$  y condiciones de frontera triviales (Dirichlet, Neumann o Robin [20]).

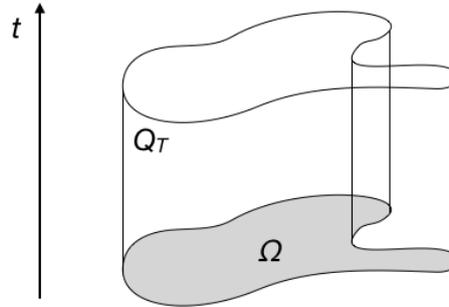


Figura 3.1: Esquema del dominio  $Q_T$ .

Multiplicando la ecuación homogénea por  $w$  e integrando sobre  $\Omega$ , se tiene

$$\int_{\Omega} w w_t dV = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} w^2 dV = D \int_{\Omega} w \Delta w dV. \quad (3.4)$$

De las identidades de Green [21] (integración por partes): Si  $u \in C^2(\Omega)$  (las derivadas parciales de orden dos de  $u$  son continuas en el espacio  $\Omega$ ),  $v \in C^1(\Omega)$  y  $\nu$  el vector normal a la superficie de  $\partial\Omega$ ,  $d\sigma$  el diferencial sobre la superficie de  $\partial\Omega$  entonces:

$$\int_{\Omega} v \Delta u dV = \int_{\partial\Omega} v \partial_{\nu} u d\sigma - \int_{\Omega} \nabla v \cdot \nabla u dV.$$

Sustituyendo  $u = v = w$  en 3.4

$$\int_{\Omega} w \Delta w dV = \int_{\partial\Omega} w \partial_{\nu} w d\sigma - \int_{\Omega} |\nabla w|^2 dV. \quad (3.5)$$

### 3.1. ECUACIÓN DE DIFUSIÓN

Definimos la función

$$E(t) = \int_{\Omega} w^2 dV$$

de 3.4 y 3.5

$$\frac{1}{2}E'(t) = D \int_{\partial\Omega} w \partial_\nu w d\sigma - D \int_{\Omega} |\nabla w|^2 dV$$

el primer término de la derecha, tiene que ver con las condiciones de frontera, entonces

$$\int_{\partial\Omega} w \partial_\nu w d\sigma \leq 0$$

por lo tanto

$$E'(t) \leq 0$$

así  $E(t)$  es una función monótona decreciente y positiva. Como  $w(\mathbf{x}, 0) = 0$  entonces  $E(0) = 0$ , se sigue que

$$E(t) = 0$$

para todo  $t \geq 0$ , lo que implica que  $w(\mathbf{x}, t) \equiv 0$  en  $Q_t$ . Entonces se cumple que:

$$u = v.$$

Esto demuestra que la ecuación de difusión (3.3) tal que  $u \in C^2(\Omega)$ ,  $u \in C^1(\bar{\Omega})$  y  $u \in C^1((0, T))$  sujeto a condiciones iniciales y de frontera (Dirichlet, Neumann u otras) tiene a lo más una solución.

#### 3.1.3 Estabilidad

Notemos que  $u$  esta determinada por  $\partial Q_T$ , y se conoce como la frontera parabólica de  $Q_T$

$$\partial Q_T = \bar{\Omega} \times (t = 0) \cup \partial\Omega \times (0, T]$$

De acuerdo a la naturaleza de la ecuación de difusión, la cual describe que el flujo va de los valores altos a los bajos, se establece el *principio del máximo* [20], el cual asegura que  $u$  alcanza su valor máximo en  $\partial Q_T$ .

### 3.1. ECUACIÓN DE DIFUSIÓN

Reescribiendo el enunciado, si  $w$  es de clase  $C^2(\overline{\Omega})$  y  $C([0, T])$  tal que

$$w_t - D\Delta w = q \leq 0$$

en el dominio  $Q_T$ , entonces  $w$  alcanza su máximo en  $\partial Q_T$ , es decir,

$$\max_{Q_T} w = \max_{\partial Q_T} w.$$

Análogamente para el valor mínimo. Como consecuencia se tiene que

$$w_t - D\Delta w = 0 \Rightarrow \min_{\partial Q_T} w \leq w(\mathbf{x}, t) \leq \max_{\partial Q_T} w$$

para todo  $(\mathbf{x}, t) \in Q_T$

Se dice que un problema es estable cuando al someterlo a una perturbación (cambio pequeño), los cambios en la solución son pequeños. De ésta forma, con  $v$  y  $w$  soluciones a la ecuación de difusión:

$$v_t - D\Delta v = f_v \quad y \quad w_t - D\Delta w = f_w$$

si  $w \leq v$  sobre  $\partial Q_T$  y  $f_w \leq f_v$  en  $Q_T$ , entonces  $w \leq v$  en  $Q_T$  y se satisface el estimado de estabilidad:

$$\max_{\overline{Q_T}} |v - w| \leq \max_{\partial Q_T} |v - w| + T \max_{\overline{Q_T}} |f_v - f_w|.$$

Por la continuidad de  $w$  y  $v$  en  $Q_T$  podemos construir a  $v = g_v$  y  $w = g_w$  que definen las condiciones de  $\partial Q_T$  tal que satisfacen

$$\begin{aligned} \max_{\partial Q_T} |g_v - g_w| &\leq \epsilon \quad y \quad \max_{\overline{Q_T}} |f_v - f_w| \leq \epsilon \\ &\Rightarrow \\ \max_{\overline{Q_T}} |v - w| &\leq \epsilon(1 + T). \end{aligned}$$

Entonces, en un tiempo  $T$  finito, un cambio pequeño en las condiciones iniciales implica una separación pequeña entre las soluciones correspondientes. De esta forma, cualquier perturbación es constante o disminuye a través del tiempo.

### 3.1. ECUACIÓN DE DIFUSIÓN

La estabilidad es la última condición para tener un problema bien planteado y se concluye que *cualquier problema de difusión (ec. 3.3) sujeto a condiciones iniciales y de frontera es un problema bien planteado.*

#### 3.1.4 Solución Fundamental

Dado un operador diferencial parcial  $L$ , la solución fundamental es una formulación a través de la teoría de distribuciones. Estas se usan ampliamente en las EDP, donde puede ser más fácil establecer la existencia de soluciones de distribución que las soluciones clásicas, o incluso que las soluciones clásicas pueden no existir. Las distribuciones son importantes en física e ingeniería, donde muchos problemas conducen naturalmente a ecuaciones diferenciales cuyas soluciones o condiciones iniciales son distribuciones, por ejemplo la distribución delta de Dirac  $\delta(x)$ . En [22] se aborda este tema en general de forma detallada, en particular estudia a distintos operadores diferenciales.

Sea  $L$  un operador diferencial lineal, se dice que  $S$  es solución fundamental de  $L$  si satisface

$$LS = \delta(x).$$

La ecuación de difusión tiene una solución fundamental para la ecuación homogénea, en  $\mathbb{R}^n$  está dada por:

$$S(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{n/2}} \exp\left(-\frac{|\mathbf{x}|^2}{4Dt}\right) \quad , \quad t > 0 \quad (3.6)$$

donde  $|\mathbf{x}|$  es el módulo del vector  $\mathbf{x}$ .

Observemos que tan pronto como  $t > 0$ ,  $S$  es positiva en todo el espacio, lo cual dice que la masa se difunde instantáneamente en todo el dominio y por tanto su velocidad de propagación es infinita. Esto es un problema usando la ecuación de difusión Difusión2 como un modelo realista. Sin embargo, podemos argumentar que la función fuera del intervalo de radio  $4Dt$  es prácticamente cero.

A partir de la solución fundamental se resuelve el problema global de Cauchy, que consiste en encontrar la solución a ec. Difusión2 sujeto a condiciones iniciales.

$$\begin{cases} u_t - D\Delta u = f(\mathbf{x}, t) & \text{en } Q_T \\ u(\mathbf{x}, 0) = g(\mathbf{x}) & \text{en } \Omega \end{cases}$$

### 3.2. MOVIMIENTO BROWNIANO

de acuerdo a [22] (Sec. 4.3.1) se obtiene:

$$u(\mathbf{x}, t) = \int_{R^n} g(\mathbf{y})S(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t)d\mathbf{y} + \int_0^t \int_{R^n} f(\mathbf{y}, s)S(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - s)d\mathbf{y}ds.$$

Notemos que  $S(\mathbf{x})$  es una distribución gaussiana que muestra la forma en la que evoluciona la distribución espacial, a medida que  $t$  crece la amplitud de  $S$  disminuye y la campana aumenta de grosor debido ya que el coeficiente de varianza  $\sigma^2 = 2Dt$  aumenta. Dicho incremento es proporcional a  $\sqrt{t}$ , por lo tanto a tiempos  $t$  cercanos a 0 el estado inicial  $g(\mathbf{x})$  cambia más rápido que para tiempos grandes. De nuevo, se tiene que los estados futuros solo dependen del estado inicial  $t = 0$ . Esto prueba la *existencia* de una solución a la ec. de difusión.

La solución fundamental  $S$  muestra un fenómeno propio de la difusión: aunque la información inicial no sea diferenciable en un número finito de puntos (o discontinua), la solución es suave para  $t > 0$ . Esto fue demostrado por J. Nash mostrando las soluciones regulares para las EDP parabólicas [23] [24], ver Fig. 3.2.

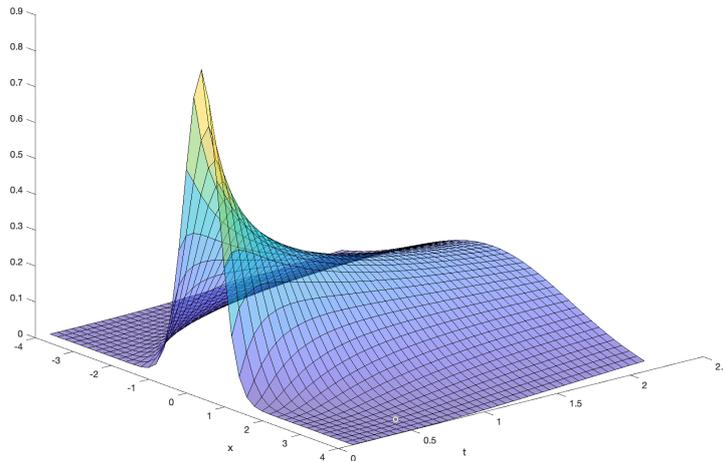


Figura 3.2: Evolución de  $u$  como solución a la ecuación homogénea ( $f = 0$ ) en  $R$  y condición inicial  $g(x) = \delta(x)$

### 3.2 Movimiento Browniano

Hasta este punto, no se ha dicho cómo obtener el valor del coeficiente de difusión  $D$ . Éste se puede medir experimentalmente para diferentes gases, pero depende de la temperatura y la viscosidad del sistema, lo cual lo vuelve poco práctico. Se requiere una fórmula para poder

### 3.2. MOVIMIENTO BROWNIANO

calcular el valor de  $D$  dada la viscosidad y la temperatura. Para esto podemos nuevamente recurrir a la visión microscópica.

Una idea aceptable del movimiento de las partículas contaminantes, es pensar que éste se mueve principalmente debido a 2 tipos de fuerza. La primera de ellas es el resultado de la acción de un campo externo (por ejemplo la gravedad o campos eléctricos externos), y la segunda es considerar una fuerza estocástica debido a las múltiples colisiones que recibe cada partícula contaminante por las moléculas de aire a su alrededor. Este es el modelo de partícula Browniana o movimiento Browniano, que recibe su nombre por el biólogo inglés Robert Brown [25], quien reportó en 1827 la trayectoria de partículas de polen en agua, observando que el movimiento era altamente irregular, aparentemente relacionado con la vida del polen. Más tarde se hicieron experimentos mostrando una dependencia entre la velocidad de los movimientos, la temperatura y la viscosidad del medio [26].

En 1905, Albert Einstein logró mostrar analíticamente [27], utilizando una visión microscópica, que el coeficiente de difusión dependía linealmente de la temperatura y era inversamente proporcional a la viscosidad, lo cual coincidía con lo observado experimentalmente. Además, Einstein utilizó sus resultados para estimar correctamente el número de Avogadro, comprobando que su teoría del movimiento Browniano era correcta. Tres años más tarde, el físico francés Paul Langevin [28] propuso otra forma de deducir el coeficiente de difusión, resolviendo una ecuación diferencial estocástica que hoy se conoce como ecuación de Langevin. La ventaja de la deducción de Langevin es por un lado que resulta más sencilla de seguirse (por lo tanto es la versión que seguiremos en este texto), y por otro lado que establece una forma sencilla de hacer simulaciones para estudiar casos de partículas Brownianas. Esta técnica para hacer simulaciones se conoce como Dinámica Browniana [29] y es muy usada para estudiar sistemas coloidales, como son los contaminantes.

#### 3.2.1 Ecuación de Langevin

Consideremos una partícula de masa  $M$  y radio  $a$  (un grano de polen o un contaminante) suspendido en un fluido cuya viscosidad es  $\eta$ .

Asumiendo que la velocidad de la partícula es  $\vec{v}$ , habrá una fuerza de arrastre de Stokes igual a  $6\pi a\eta|\vec{v}|$  [30], debido a que la partícula está sumergida en un fluido viscoso. Si esta fuerza viscosa fuera la única que actuara sobre la partícula (en ausencia de campos externos), entonces  $|\vec{v}| = v$  se aproxima a 0 de forma exponencial. Sin embargo, el teorema

### 3.2. MOVIMIENTO BROWNIANO

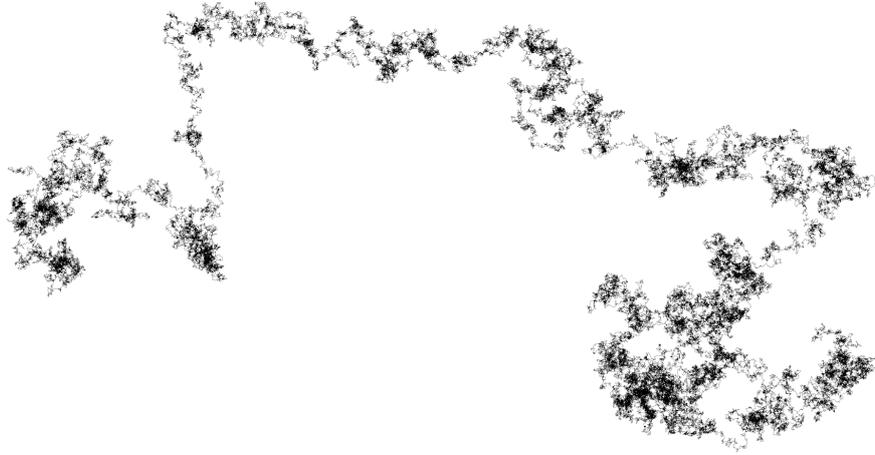


Figura 3.3: Simulación de movimiento browniano en 2 dimensiones.

de equiparación de la energía cinética requiere que:

$$\frac{1}{2}M\langle v^2 \rangle = \frac{k_B T}{2}. \quad (3.7)$$

La partícula está sujeta a una fuerza estocástica  $\vec{X}(t)$  debido a las colisiones en un intervalo de tiempo corto para la observación, pero suficientemente largo para que ocurra un número grande de colisiones. En condiciones normales de presión y temperatura ( $P \sim 1 \text{ atm}$  y  $T \sim 293 \text{ K}$ ), si la partícula en cuestión es mucho más grande que las moléculas del fluido, siguiendo las ideas de la teoría cinética, se puede encontrar que el número de colisiones que recibe la partícula por segundo es muy grande, en particular para un grano de polen en agua, es del orden de  $10^8$  colisiones/s. Como el número de colisiones es grande y cada colisión tiene una misma distribución de probabilidad, según el teorema del límite central  $\vec{X}(t)$  debe tener una distribución normal. Además, no hay razón para que la partícula tenga un movimiento en alguna dirección preferencial, por lo que  $\vec{X}(t)$  debe tener valor esperado 0.

Ahora, considerando el caso general donde existe una fuerza  $\vec{F}_e(t)$  debido a un campo externo, la dinámica de la partícula está descrita por:

$$M \frac{d\vec{v}}{dt} = -6\pi a \eta \vec{v} + \vec{F}_e(t) + \vec{X}(t)$$

o bien, re-acomodando los términos para tener  $\ddot{x} = \dot{v} = \frac{\ddot{x}}{dt}$  en un lado de la ecuación,

### 3.2. MOVIMIENTO BROWNIANO

tenemos:

$$M\ddot{x} + \alpha\dot{x} = \vec{F}_e(t) + \vec{X}(t), \quad (3.8)$$

que es la ecuación de Langevin. Aquí  $\alpha = 6\pi a\eta$ , aunque en un caso general corresponde a la fuerza de arrastre la partícula, la cual depende de su geometría.

Ésta ecuación estocástico-diferencial, en general, no es sencilla de resolver por lo que se suelen usar métodos numéricos. En el caso donde no se consideran interacciones o campos, lo que se obtiene es un movimiento Browniano como el de la Figura 3.3.

#### 3.2.2 Partícula Browniana libre y la relación de Einstein-Stokes

Resolveremos la ecuación ec:Langevin para el caso 1D en ausencia de un campo externo. El caso 2D y 3D son similares, ya que en ausencia de un campo externo la ecuación (3.8) se puede descomponer en 3 ecuaciones independientes. Multiplicando la ecuación (3.8) por  $x$  obtenemos:

$$M\ddot{x}x + \alpha\dot{x}x = xX(t) \quad (3.9)$$

Además,  $\frac{d}{dt}(x\dot{x}) = x\ddot{x} + \dot{x}^2$ , o bien,  $x\ddot{x} = \frac{d}{dt}(x\dot{x}) - \dot{x}^2$ , por lo que la ecuación (3.9) se vuelve:

$$M\left(\frac{d}{dt}(x\dot{x}) - \dot{x}^2\right) = -\alpha\dot{x}x + xX(t)$$

Tomando promedios de ensamble de esta ecuación obtenemos:

$$M\left(\frac{d}{dt}\langle x\dot{x} \rangle - \langle \dot{x}^2 \rangle\right) = -\alpha\langle \dot{x}x \rangle + \langle xX(t) \rangle$$

ya que el operador  $\langle \cdot \rangle$  es un operador lineal, al igual que la derivada. Considerando que  $X(t)$  es un ruido blanco no habrá correlaciones temporales entre  $X(t)$  y  $x$ , por lo que  $\langle xX(t) \rangle = \langle x \rangle \langle X(t) \rangle = 0$ , ya que  $\langle X(t) \rangle = 0$ . Entonces, la ecuación anterior se transforma en:

$$M\left(\frac{d}{dt}\langle x\dot{x} \rangle - \langle \dot{x}^2 \rangle\right) = M\left(\frac{d}{dt}\langle x\dot{x} \rangle - \frac{k_B T}{M}\right) = M\frac{d}{dt}\langle x\dot{x} \rangle - k_B T = -\alpha\langle \dot{x}x \rangle \quad (3.10)$$

### 3.2. MOVIMIENTO BROWNIANO

dónde se usó el principio de equiparación en el primer paso de la igualdad. Esta ecuación tiene la gran ventaja de ser una ecuación diferencial ordinaria lineal de una sola variable, por lo que se puede resolver exactamente y la solución es:

$$\langle x\dot{x} \rangle = C \exp(-\alpha t/M) + \frac{k_B T}{\alpha}$$

Si a  $t = 0$ ,  $x = 0$ , entonces  $C = -\frac{k_B T}{\alpha}$ . Notemos que  $\langle x\dot{x} \rangle = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle$ , por lo que la ecuación anterior se vuelve:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{\alpha} (1 - \exp(-\alpha t/M))$$

la cual es otra ecuación diferencial lineal de una sola variable, cuya solución es:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2k_B T}{\alpha} \left( t - \frac{M}{\alpha} (1 - \exp(-\alpha t/M)) \right). \quad (3.11)$$

Para tiempos largos ( $t \gg \frac{M}{\alpha}$ ), la exponencial se va a 0 y el desplazamiento cuadrático medio  $\langle x^2 \rangle$  queda dominado por el primer término, es decir, por el comportamiento lineal de  $t$ .

$$\langle x^2 \rangle \sim \frac{2k_B T}{6\pi a \eta} t \quad (3.12)$$

Reconociendo el comportamiento difusivo  $\langle x^2 \rangle = 2Dt$ , se obtiene la relación de Einstein-Stokes

$$D = \frac{k_B T}{6\pi a \eta}. \quad (3.13)$$

En el caso 2 y 3 dimensional, el comportamiento difusivo va como  $\langle x^2 \rangle \sim 4Dt$  y  $\langle x^2 \rangle \sim 6Dt$ , respectivamente. Puesto que en 2 y 3 dimensiones se tienen 2 y 3 ecuaciones idénticas respectivamente y la difusión total es el resultado de sumar las 2 y 3 contribuciones respectivamente, el coeficiente de difusión que se obtiene es el mismo.

De esta forma, si se conoce la viscosidad del medio, la masa y el radio de las partículas que se difundirán, se puede calcular el coeficiente de difusión como función de la temperatura.

## 3.2. MOVIMIENTO BROWNIANO

### 3.2.3 Ecuación de Langevin con campo gravitatorio dentro de un medio

El mismo procedimiento que se usó en la subsección anterior se puede seguir para el caso donde hay un campo gravitatorio. Las ecuaciones para el movimiento en el plano  $x, y$  van a ser exactamente las mismas. Sin embargo, se tendrá un término que corresponde a la fuerza gravitacional en la dirección del eje  $z$ , se sustituye el término  $Mg\vec{z}$  a la ecuación (3.8). Naturalmente, la partícula se difundirá hasta encontrar el suelo.

$\langle z \rangle$  se puede estimar reconociendo que la contribución, sin considerar la fuerza gravitacional, es 0, mientras que si hay una aceleración, debido a la fuerza de arrastre, la partícula llegará a una velocidad terminal. Por lo tanto  $\langle z \rangle \sim -v_t t = \frac{Mg}{\alpha} t$ , así la ecuación (3.10) se transforma en

$$M \frac{d}{dt} \langle z\dot{z} \rangle - k_B T - \frac{(Mg)^2}{\alpha} t = -\alpha \langle \dot{z}z \rangle, \quad (3.14)$$

cuya solución en el límite  $t \gg M/\alpha$  y  $M$  relativamente pequeño, es:

$$\langle z^2 \rangle = \frac{2k_B T}{\alpha} t + \frac{(Mg)^2}{\alpha^2} t^2, \quad (3.15)$$

es decir, en la dirección  $z$ , la partícula se difundirá con una velocidad promedio constante hasta llegar al suelo. El efecto neto es que el contaminante se difunde rápidamente en la dirección  $z$ , generando una distribución barométrica dada por:

$$f(z)dz = \frac{NMg}{k_B T} \exp(Mgz/k_B T),$$

que es la distribución en equilibrio [31]. Por esta razón y dado que los ciclistas se mueven en un rango de  $z$  (más o menos constante) cercano al suelo, es aceptable considerar sólo la difusión del contaminantes en 2D y no en 3D.

# 4 | Métodos numéricos

## 4.1 Introducción Ecuaciones Diferenciales Parciales

Las ciencias, en gran parte, estudian la predicción de fenómenos, ya sean físicos, biológicos, financieros, químicos, entre otros. Dichas predicciones pueden derivarse de modelos matemáticos, los cuales consisten en relaciones o ecuaciones capaces de capturar diversas características del sistema.

En general, las relaciones constitutivas y las leyes generales son la base para la construcción de un modelo matemático y dependen intrínsecamente del sistema, por ejemplo: la conservación de masa, la conservación de energía, la ley de Fourier, entre otras. En conjunto, se derivan una ecuación diferencial parcial (EDP) o un conjunto de las mismas.

Naturalmente encontrar la solución, ya sea analítica o numérica, a la EDP (bajo ciertas condiciones) implica conocer el comportamiento del sistema del cual fue derivada y por tanto se puede predecir su evolución. Además resulta que de una EDP se pueden inferir propiedades del sistema sin aún saber la solución.

Desde el punto de vista matemático, una EDP es la relación entre una función, las variables independientes, y los cambios respecto a estas variables. La derivada parcial de  $u$  respecto a la variable  $x_n$ , es denotada por:  $\frac{\partial u}{\partial x_n}$  o  $u_{x_n}$  o  $\partial_{x_n} u$ . Así la forma más general de escribir una EDP es:

$$F(u, x_0, \dots, x_n, u_{x_0}, \dots, u_{x_n}, u_{x_0 x_0}, u_{x_0 x_1}, \dots, u_{x_n x_n}, u_{x_0 x_0 x_0}, \dots) = 0. \quad (4.1)$$

$u(x_1, x_2, \dots, x_n)$  es la función que describe al sistema dependiente de  $n$  variables. En problemas físicos estas variables no necesariamente son espaciales, de esta forma podemos definir a la variable del tiempo  $t = x_0$ . En termodinámica usamos variables como la presión, volumen, temperatura, etc.

El orden de la ecuación es definido por el orden más alto de diferenciación en  $F$ . Además la ecuación es lineal si  $F$  es lineal respecto a  $u$ , sus variables y sus derivadas; en otro caso, la

## 4.2. PROBLEMAS BIEN PLANTEADOS

EDP es no lineal [20].

Entonces, si  $L$  es un operador diferencial y  $f$  es función de  $u$ , se puede reescribir (4.1) de la siguiente forma:

$$Lu = f, \tag{4.2}$$

que es una ecuación no homogénea. Dado que  $L$  es un operador lineal, suponiendo que  $u$  y  $v$  son soluciones y  $a$  es constante, entonces  $L(u + v) = L(u) + L(v)$  y  $L(av) = aL(v)$ , lo cual se conoce como el principio de superposición. A (4.2) se le nombra ecuación no homogénea y a  $Lu = 0$  homogénea [21].

Algunas ecuaciones lineales son:

- Ecuación de Onda (segundo orden)

$$u_{tt} - c^2 \Delta u = 0$$

Donde  $\Delta$  es el operador laplaciano dado por  $\Delta = \nabla \cdot \nabla = \sum_{i=1}^n \partial_{x_i x_i}$ . Describe la propagación de ondas (transversales o longitudinales), por ejemplo: las ondas electromagnéticas en el vacío o las ondas de sonido. En dado caso  $u$  representa la amplitud de onda y  $c$  la velocidad de propagación.

- Ecuación de Schrödinger (segundo orden)

$$i\hbar u_t = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u + V(x)u$$

Describe la evolución de una partícula cuántica bajo un potencial  $V$ . En este caso  $|u|^2$  representa la densidad de probabilidad.

## 4.2 Problemas Bien Planteados

Además de la construcción de una EDP a través de las leyes generales y las relaciones constitutivas, se necesita información adicional para tener un problema bien planteado (well posed problem). En general estos problemas consisten en una EDP definida en cierto dominio y bajo ciertas condiciones iniciales, de frontera u otras condiciones auxiliares. Se dice que el problema a la EDP está bien planteado si tiene las siguientes propiedades [21]:

- a) Existencia: existe al menos una solución  $u(x, t)$  que satisface todas las condiciones.

### 4.3. CONDICIONES DE FRONTERA

- b) Unicidad: existe a lo más una solución.
- c) Estabilidad: en los problemas lineales la solución depende continuamente en las condiciones del problema, por ejemplo: un pequeño cambio en las condiciones iniciales conlleva a un pequeño cambio en la solución.

A los problemas físicos comúnmente se les asocia la estabilidad respecto a la variable temporal. De esta forma, bajo pequeñas perturbaciones en la solución se espera que la dicha perturbación se mantenga pequeña o que decaiga a cero a través del tiempo.

Para las EDP lineales, un pequeño cambio en la solución, de acuerdo a la ec. (4.2), quiere decir:

$$L(u + \delta u) = f + \delta f \Leftrightarrow L(\delta u) = \delta f.$$

Al ser el operador  $L$  lineal, se tiene que  $\delta u$  es solución con la parte no homogénea  $\delta f$ . De esta forma se pueden definir que un problema es estable si:

$$|\delta u|_a \leq C |\delta f|_b$$

ó

$$|u|_a \leq C |f|_b,$$

las normas son definidas de acuerdo al problema en cuestión.

La existencia de una solución da certeza al modelo matemático, mientras que la unicidad y estabilidad aseguran el encontrar soluciones numéricas apropiadas (en el sentido físico).

A los problemas que no cumplen con alguna de las tres condiciones se les llama problemas mal planteados (ill posed problems) los cuales forman un amplio campo de estudio. Han sido útiles en las tecnologías actuales como el reconocimiento de patrones o procesamiento de imágenes.

### 4.3 Condiciones de frontera

Los problemas sujetos a condiciones iniciales y/o de frontera son llamados problemas de valores de frontera (BVP), y cumplen las condiciones de existencia y unicidad de una solución, la cual no necesariamente es estable.

### 4.3. CONDICIONES DE FRONTERA

Al tener una función de la forma  $u \equiv u(\mathbf{x}, t)$  definida en el dominio  $\Omega$  y  $x \in R^n$ ; las condiciones más comunes son ([20] Sec. 3.1.5):

- Condiciones iniciales

$$u(\mathbf{x}, t = 0) = f(\mathbf{x}),$$

para toda  $\mathbf{x} \in \Omega$

- Condiciones de frontera Dirichlet

$$u(\mathbf{x}, t) = g(\mathbf{x}, t),$$

para toda  $\mathbf{x} \in \partial\Omega$ . Especifica el valor de la función  $u$  en la frontera del dominio  $\Omega$ . La función  $g$  puede no depender del tiempo e incluso ser constante.

- Condiciones de frontera Neumann

$$\frac{\partial u}{\partial n}(\mathbf{x}, t) = \vec{n} \cdot \nabla u = g(\mathbf{x}, t),$$

para toda  $\mathbf{x} \in \partial\Omega$ . El vector  $\vec{n}(\mathbf{x})$ , indica el vector exterior normal a la superficie en el punto  $\mathbf{x}$ . Ver Figura 4.1

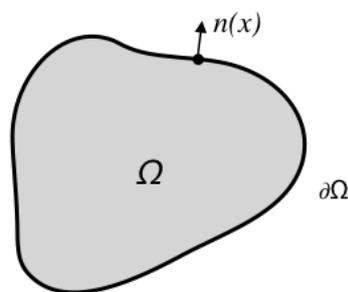


Figura 4.1: Esquema de un espacio  $\Omega$  2D

- Condiciones de frontera Robin

$$\alpha u(\mathbf{x}, t) + \beta \frac{\partial u}{\partial n}(\mathbf{x}, t) = g(\mathbf{x}, t),$$

para toda  $\mathbf{x} \in \partial\Omega$ . Usualmente  $\alpha$  y  $\beta$  son constantes, en dado caso es una combinación lineal de las condiciones Dirichlet y Neuman [32].

## 4.4 Método de Diferencias Finitas

Si bien una EDP ya proporciona información de un problema físico a través del modelo matemático aún sin conocer la solución, al encontrar la solución se sabrá el comportamiento directo del problema físico, además de analizar las variaciones de los parámetros, observar gráficamente la solución, etc.

La solución a una EDP, con las condiciones de un problema bien planteado, difícilmente es analítica. Las condiciones iniciales y de frontera son las principales causas. Es por eso que se implementan métodos numéricos los cuales permiten encontrar una solución aproximada a una EDP, que en su mayoría son aproximaciones en series de la solución. Entre los métodos más comunes se encuentra elemento finito, diferencias finitas y volumen finito.

El método de diferencias finitas consiste en la representación de operadores diferenciales aproximando sus derivadas mediante diferencias finitas y obteniendo un sistema algebraico que depende tanto de la discretización (del dominio de la solución  $u$ ) como de sus condiciones iniciales y/o de frontera. En una EDP, naturalmente el encontrar la solución dependerá si se trata de un problema bien planteado [32].

El reemplazo de las derivadas la mayoría de veces se realiza a través de expansiones en series de Taylor. Suponiendo que  $u$  es una función con  $n$  derivadas continuas, se puede aproximar  $u$  hasta el orden  $n$  en serie de Taylor.

Supongamos  $u$  es al menos de clase  $C^2$  (sus derivadas de orden 2 existen y son continuas) y por simplicidad que es función de una variable. En varias variables los resultados se obtienen de la misma forma. Aproximando con serie de Taylor de  $u$  a segundo orden, se tiene:

$$u(x+h) = u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(\xi), \quad (4.3)$$

para algún  $\xi \in (x, x+h)$ . El tercer término indica el orden de error de aproximación, que en este caso es proporcional a  $h^2$  cuando  $h \rightarrow 0$  y se denota como  $\mathcal{O}(h^2)$ . Por lo tanto

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x)}{h} + \mathcal{O}(h), \quad (4.4)$$

al error del cociente  $\mathcal{O}(h)$  Se le conoce como error de truncamiento y en este caso es proporcional a  $h$ , en general cada método en diferencias finitas tiene un error de truncamiento de orden  $q$  y se representa como  $\mathcal{O}(h^q)$ . Observemos que  $u'$  es similar a la definición de la derivada mediante el límite del cociente con  $h \rightarrow 0$  y que existe una constante  $C$ , tal que para  $h > 0$  suficientemente pequeña se tiene:

#### 4.4. MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS

$$\left| u'(x) - \frac{u(x+h) - u(x)}{h} \right| \leq hC.$$

En general, se dice que el método numérico es consistente con la ecuación diferencial si para cualquier  $\epsilon > 0$  existe un  $h(\epsilon) > 0$  tal que  $|\mathcal{O}(h^q)| \leq \epsilon$  para  $0 < h < h(\epsilon)$ .

La aproximación de  $u'$  en el punto  $x$  es de primer orden y se conoce como Método de Euler adelante. El equivalente de un paso atrás, esta dada por  $u(x-h)$  como:

$$u(x-h) = u(x) - hu'(x) + \mathcal{O}(h^2), \quad (4.5)$$

por lo tanto:

$$u'(x) = \frac{u(x) - u(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h). \quad (4.6)$$

Se puede calcular aproximaciones incluyendo más términos en la expansión de  $u(x+h)$  y  $u(x-h)$ , entonces

$$u(x \pm h) = u(x) \pm hu'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) \pm \frac{h^3}{3!}u'''(\xi_{\pm}), \quad (4.7)$$

restando los términos se obtiene

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2), \quad (4.8)$$

esta ecuación (4.8) representa una aproximación de segundo orden, ya que el error es proporcional a  $h^2$ , y se le llama diferencias finitas centradas de  $u'(x)$ . Al sumar los términos de (4.7) se puede aproximar a  $u''(x)$  como:

$$u''(x) = \frac{u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2). \quad (4.9)$$

El principal objetivo de los métodos numéricos es encontrar la solución a un problema bien planteado de valores iniciales. En la implementación es necesario discretizar el dominio de  $u$ . Consideremos (en 1D) que la función  $u(x)$  está definida en un intervalo  $[x_0, x_0 + L]$ , la solución numérica a través de diferencias finitas será determinada en la malla de un número finito de  $M + 1$  puntos que dividen al intervalo del dominio, es decir,

#### 4.4. MÉTODO DE DIFERENCIAS FINITAS

$$x_0 < x_1 < \dots < x_M = x_0 + L$$

la distancia entre cada punto no necesariamente es la misma. Se busca una aproximación numérica de  $u(x)$  en los puntos de la malla:  $u(x_n), n = 0, 1, \dots, M$ , denotaremos a  $u(x_n)$  como  $u_n$ . En la Figura 4.2 se observa la aproximación de la derivada en el nodo  $x_n$  a partir de la discretización del dominio y los valores  $u_{n-1}, u_n$  y  $u_{n+1}$ . La aproximación de paso atrás está dada por el segmento AB, paso adelante por BC y la centrada por AC.

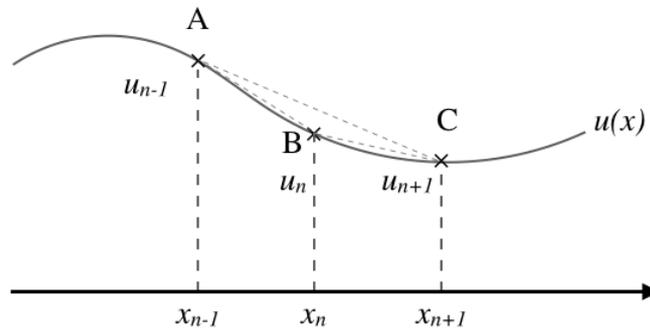


Figura 4.2: Aproximación de  $u'$  en el nodo  $x_n$

De acuerdo a las ecuaciones (4.4), (4.6) y (4.9) y suponiendo que los nodos están igualmente separados a una distancia  $h = x_{n+1} - x_n$  se tiene :

$$u'(x_n) \approx \frac{u_{n+1} - u_n}{h} \quad \text{paso adelante}$$

$$u'(x_n) \approx \frac{u_n - u_{n-1}}{h} \quad \text{paso atrás}$$

$$u'(x_n) \approx \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2h} \quad \text{centrado 1er orden}$$

$$u''(x_n) \approx \frac{u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}}{h^2} \quad \text{centrado 2do orden} \quad (4.10)$$

La malla igualmente permite determinar qué tanto se está aproximando el método a la solución exacta. Si la solución exacta y la solución aproximada en la malla está dada por  $u_n^{ex}$  y  $u_n^{ap}$ ,  $n = 0, 1, \dots, M$ , el error se estima mediante las diferencias cada uno de los puntos. Se define el error global como:

#### 4.5. DIFERENCIAS FINITAS PARA DIFUSIÓN

$$e_n = u_n^{ex} - u_n^{ap}.$$

Además el valor de  $h$  comienza a tener sentido, siempre y cuando se cumplan las condiciones de estabilidad que son determinadas tanto por el método a utilizar como por la ecuación diferencial a tratar. En principio cada término  $u_n^{ap}$  converge al correspondiente  $u_n^{ex}$  cuando  $M \rightarrow \infty$ , esto es, se puede lograr la precisión deseada eligiendo a  $M$  apropiadamente, de lo contrario (con un  $M$  no suficientemente grande) el método puede fallar tanto en términos de convergencia como de consistencia. Tener que tomar valores grandes de  $M$  para cumplir con la tolerancia de precisión deseada resulta muchas veces poco práctico (en el sentido computacional) y es lo que impulsa a la búsqueda de métodos numéricos más eficientes [33]. En nuestro caso utilizamos un esquema simple y explícito, que veremos en la siguiente sección, para resolver la ecuación de difusión.

### 4.5 Diferencias Finitas para Difusión

Para este trabajo se toma en cuenta únicamente el caso 2D de la ecuación de difusión:

$$u_t - D(u_{xx} + u_{yy}) = f.$$

El primer paso es la discretización del dominio  $Q_T = [x_0, x_0 + L] \times [y_0, y_0 + K] \times [t_0, t_0 + t]$ . Lo dividimos en  $N$ ,  $M$  y  $T$  partes iguales tal que las separaciones entre cada nodo de la malla son:

$$\Delta x = l, \quad \Delta y = k \quad y \quad \Delta t = h$$

y denotamos a los valores de  $u$  y  $f$  en la malla por  $u_{i,j}^n \equiv u(x_i, y_j, t_n)$  y  $f_{i,j}^n \equiv f(x_i, y_j, t_n)$ , para  $i = 0, \dots, N$ ,  $j = 0, \dots, M$  y  $n = 0, \dots, T$ .

El siguiente paso es reemplazar las derivadas por las aproximaciones de diferencias finitas (Capítulo 2), dadas por la ec. 4.10, la aproximación del laplaciano  $\Delta$  mediante diferencias centradas y la derivada en el tiempo mediante paso adelante; este esquema es conocido como Euler adelante y es un método explícito tanto en tiempo como en espacio:

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{h} = D \left[ \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{k^2} + \frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{l^2} \right] + f_{i,j}^n.$$

#### 4.5. DIFERENCIAS FINITAS PARA DIFUSIÓN

Se ha aproximado la EDP a un problema algebraico, o también llamado ecuaciones discretas, por lo tanto el problema es relativamente más fácil de resolver. Anticipando que conocemos el estado inicial dado por  $u_{i,j}^n$ , entonces los valores de  $u_{i,j}^{n+1}$  es lo único desconocido, por lo tanto se dice que el esquema es explícito. Resolviendo para este término, se obtiene:

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n + Dh \left[ \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{k^2} + \frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{l^2} \right] + hf_{i,j}^n. \quad (4.11)$$

El esquema de los nodos de esta ecuación ser representados por un *stencil* Fig. 4.3.

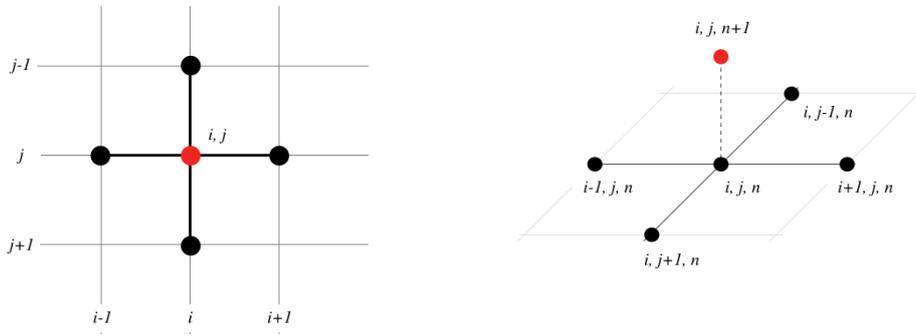


Figura 4.3: Stencil de la ecuación de difusión en 2D

La estabilidad del método se puede estimar bajo el análisis de von Neumann, en el que se considera el crecimiento del error dado por  $\epsilon = U_{i,j}^n - u_{i,j}^n$ , donde  $U$  es la solución exacta y  $u$  la solución discreta; por lo tanto se obtiene una ecuación discreta para  $\epsilon$  con  $\alpha = Dh/l^2$  y  $\beta = Dh/k^2$  la ecuación para  $\epsilon$  tiene la forma [34]:

$$\epsilon_{i,j}^{n+1} = \alpha(\epsilon_{i+1,j}^n + \epsilon_{i-1,j}^n) + \beta(\epsilon_{i,j+1}^n + \epsilon_{i,j-1}^n) + (1 - 2\alpha - 2\beta)\epsilon_{i,j}^n,$$

esta relación muestra que el error y la solución numérica tienen el mismo comportamiento de crecimiento (o decaimiento) respecto al tiempo.

Tomando el ansatz  $\epsilon_{i,j}^n = G^n e^{ik_x x} e^{ik_y y}$ , se llega a la siguiente relación para  $G(k)$  (se le conoce como factor de amplificación)

$$G(k) = 1 - 4\alpha \sin^2(k_x l/2) - 4\beta \sin^2(k_y k/2),$$

$k_x = \frac{\pi i}{L}$  es el número de onda en la coordenada  $x$  e  $i = 0, 1, \dots, N$ , análogamente para  $k_y$ . El método es estable cuando se obtiene una solución numérica que decae respecto a  $t$ , la condición de que esto ocurra es:

#### 4.5. DIFERENCIAS FINITAS PARA DIFUSIÓN

$$|G(k)| \leq 1.$$

En este caso se cumple si  $\alpha + \beta \leq 1/2$ , es decir,

$$Dh \left( \frac{l^2 + k^2}{l^2 k^2} \right) \leq \frac{1}{2}. \quad (4.12)$$

El error de truncamiento casi siempre se puede calcular y representa el error en el modelo numérico cuando la solución exacta se sustituye en las ecuaciones. En particular, el análisis de error de truncamiento indica el orden del esquema, que es de fundamental importancia cuando se verifican códigos basados en la estimación empírica de las tasas de convergencia. El error de truncamiento de este esquema está dado por:

$$\mathcal{O} = \mathcal{O}(h) + \mathcal{O}(l^2) + \mathcal{O}(k^2). \quad (4.13)$$

Existen otros esquemas que permiten pasos en  $t$  más grandes debido a que sus condiciones de estabilidad lo permiten, por ejemplo, el esquema de Crank-Nikolson es implícito en el tiempo y su error de truncamiento en el tiempo va como  $\mathcal{O}(h^2)$ .

## 5 | Implementación del método

El objetivo es el desarrollo de un algoritmo que permita resolver el esquema discreto de la ecuación de difusión no homogénea en dos dimensiones (4.11) en un espacio arbitrario  $\Omega$ , es decir, un espacio con diferentes tipos de frontera que no son necesariamente cuadradas.

Bajo el esquema explícito (4.11), para conocer el valor de  $u_{i,j}^{n+1}$  es necesario conocer cada uno de los términos del lado derecho.

### 5.1 Descripción del espacio discreto

El primer paso es la discretización de las coordenadas  $x$  y  $y$  en los intervalos  $[x_0, x_0 + L]$  y  $[y_0, y_0 + K]$ :

$$X = [x_0, x_0 + \frac{1L}{N}, x_0 + \frac{2L}{N}, \dots, x_0 + L] = [x_0, x_1, \dots, x_N],$$

$$Y = [y_0, y_0 + \frac{1K}{M}, y_0 + \frac{2K}{M}, \dots, y_0 + K] = [y_0, y_1, \dots, y_M].$$

Dicha discretización determina las dimensiones del espacio de nodos  $\Omega$ , es decir, cada elemento del espacio discreto  $\Omega_{i,j}$  tiene la posición  $[i, j] = [x_i, y_j]$ . Aquí  $\Omega_{i,j}$  es una matriz que contiene información de cómo es el espacio. Si  $\Omega_{i,j} \in \partial\Omega$  se consideró el siguiente criterio:

$$\Omega_{i,j} = \begin{cases} 0 & \text{if } \Omega_{i,j} \notin \Omega \\ 0 & \text{if } \Omega_{i,j} \in \partial\Omega(\text{Dirichlet}) \\ 1 & \text{if } \Omega_{i,j} \in \text{int}(\Omega) \\ R & \text{if } \Omega_{i,j} \in \partial\Omega(\text{Neumann}), R \in (0, 1) \\ 3 & \text{if } \Omega_{i,j} \in \partial\Omega(\text{Periodica}) \end{cases} \quad (5.1)$$

de esta forma se tiene una representación discreta  $\Omega_{i,j}$  del espacio topológico  $\Omega$  (ver Fig. 5.1). Esto permitirá, en la implementación, que el código reconozca a que tipo corresponde cada nodo.

## 5.2. CÁLCULO DE $U_{I,J}^{N+1}$

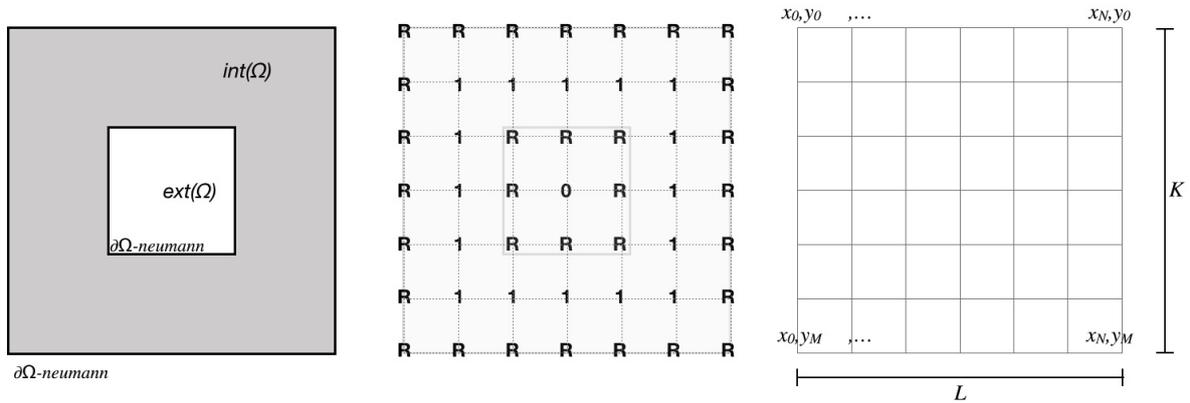


Figura 5.1: Descripción del espacio topológico  $\Omega$  con las respectivas fronteras Neumann y su representación discreta con los respectivos nodos  $\Omega_{i,j}$  con dimensiones  $X$  y  $Y$

Reconocemos a  $\Omega_{i,j}$  el dominio de  $u$ , así sus valores que tomarán los cálculos numéricos serán sobre dicho espacio, entonces el tamaño de la matriz  $u_{i,j}$  es igual al de  $\Omega_{i,j}$ . Sabemos que es necesario un estado inicial  $u^0$ , e igualmente será generado bajo el dominio discreto. Los estados para  $t = [t_1, t_2, ..]$  es simplemente la evolución del estado inicial.

## 5.2 Cálculo de $u_{i,j}^{n+1}$

El criterio para definir los tipos de nodos de  $\Omega_{i,j}$  resulta muy útil para poder calcular  $u_{i,j}^{n+1}$ . Notemos que para los nodos  $\Omega_{i,j} = 1$  se conocen todos los términos necesarios de acuerdo a la ec. 4.11, para  $\Omega_{i,j} = 0$  simplemente  $u_{i,j}^{n+1} = 0$ . Lo complicado son los nodos de las fronteras tipo Neumann o Periódicas, hay diversas formas de como aplicar este tipo de fronteras desde el punto de vista de su definición (Sección 2.3). En este caso desarrollamos un método que nos permita usar la el esquema explícito de la ecuación 4.11, utilizando nodos imaginarios, que se explican adelante.

Las **fronteras tipo Neumann** describen como se comporta la frontera respecto a  $\frac{\partial u}{\partial n}$ . De acuerdo a las condiciones Neumann 2-dimensional, en un segmento de frontera, cuya normal es la dirección  $x$ :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \alpha$$

para  $\alpha = 0$  se tienen paredes totalmente reflejantes. Sin embargo, considerando paredes que simulan los edificios en las calles, no hay fronteras 100% reflejantes, si no parte reflejantes y parte absorbentes. Cuando la frontera está en el nodo  $u_{i,j}$  con  $\bar{n} = (1, 0)$ , es posible aproximar

## 5.2. CÁLCULO DE $U_{I,J}^{N+1}$

esta característica desde la ecuación anterior mediante diferencias centradas (ec. 4.10) que es de orden  $\mathcal{O}(h^2)$ , obteniendo la siguiente relación:

$$u_{i+1,j} = \alpha 2\Delta x + u_{i-1,j} = u_{i-1,j}(1 - \beta) = u_{i-1,j}R, \quad (5.2)$$

$R$  y  $\beta$  corresponden al coeficiente de reflexión y absorción respectivamente que satisfacen  $R + \beta = 1$ .

De aquí se empieza a considerar nodos imaginarios (Fig. 5.2), ya que si  $i = 0$  o  $i = N$  en realidad no podemos tener un  $i = -1$  o  $i = N + 1$  dentro del espacio  $\Omega_{i,j}$ . Utilizamos el recurso de agregar nodos imaginarios alrededor del espacio discreto de  $\Omega$ , de modo que el tamaño de la matriz es  $[N, M] \rightarrow [N + 2, M + 2]$ , a estos nodos les asignaremos el valor de 0, ya que que se encuentran fuera del dominio. (En la implementación usamos la función `rodear(A,a)` la cual rodea a la matriz  $A$  de  $a$ 's.)

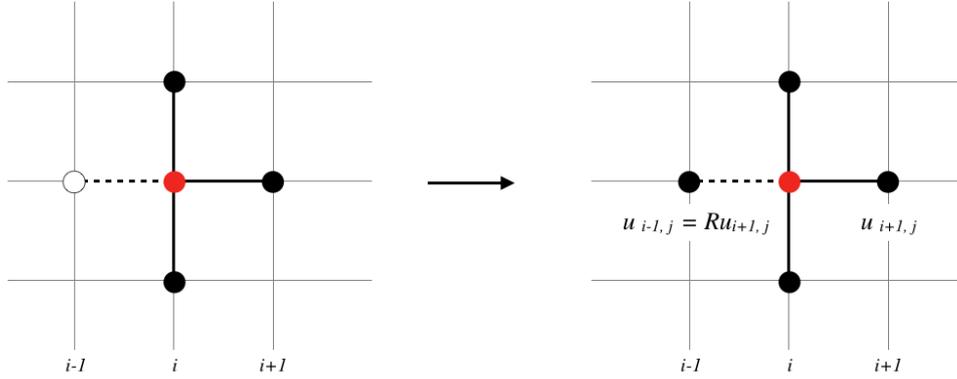


Figura 5.2: Stencil de frontera Neumann, cuando  $\bar{n} = (-1, 0)$ . El nodo imaginario está señalado por el nodo en blanco.

El paso importante es sustituir el valor correspondiente en el punto imaginario según (5.2)

- $u_{i+1,j} = Ru_{i-1,j}$  para  $\bar{n} = (1, 0)$

de esta forma se puede calcular directamente  $u_{i,j}^{n+1}$  con (4.11). El resto de los casos  $\bar{n} = [(-1, 0), (0, 1), (0, -1)]$  es análogo, mientras que los casos  $(1, 1), (1, -1), etc.$  son combinación de los anteriores. En resumen, **si se conoce a  $\bar{n}$  se puede estimar el valor del nodo imaginario correspondiente y así calcular  $u_{i,j}^{n+1}$ .**

Las **fronteras periódicas**, sólo se consideran en los extremos del dominio y se procede de manera muy similar a las de tipo Neumann. El código al reconocer que el nodo es  $\Omega_{i,j} = 3$  implementará lo correspondiente a las fronteras periódicas. De nuevo se rodea el espacio (o

### 5.3. FUENTES DE CONTAMINANTES

matriz) del espacio  $\Omega$  que funcionarán como nodos imaginarios, que serán reemplazados por los valores correspondientes a las condiciones periódicas. En este trabajo únicamente se consideran las del tipo:

$$u(x_0, y) = u(x_0 + L, y)$$

Considerando que la condición se da sobre el eje  $x$  como en la ecuación anterior, entonces los nodos imaginarios se sustituyen de acuerdo a la Fig. 5.3, y son de la forma:

- $u_{-1,j} = u_{N-1,j}$  para el nodo  $(0, j)$
- $u_{N+1,j} = u_{2,j}$  para el nodo  $(N, j)$

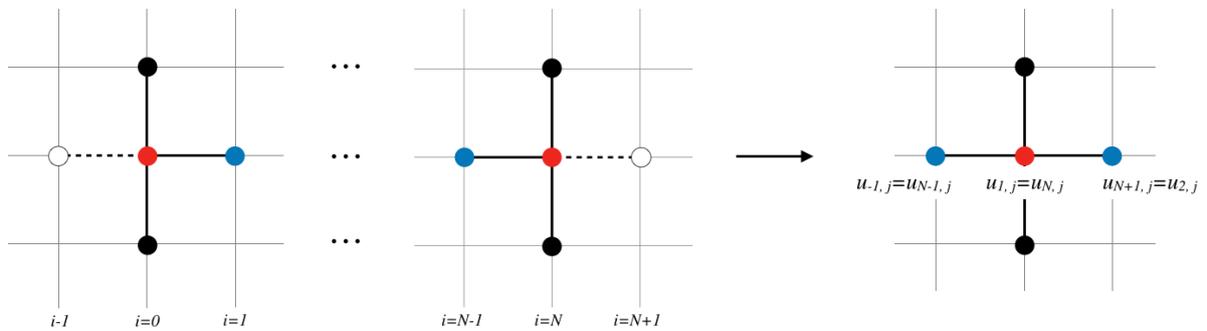


Figura 5.3: Stencil para condiciones periódicas  $u(x_0, y) = u(x_0 + L, y)$ . A la derecha se muestra la sustitución de los nodos imaginarios.

El caso de  $u(x, y_0) = u(x, y_0 + K)$  es análogo. Finalmente podemos calcular  $u_{i,j}^{n+1}$  directamente de (4.11).

### 5.3 Fuentes de contaminantes

Las fuentes de contaminantes están dadas por la distribución de  $f(x, t)$  (3.3) con  $x \in \Omega$ ,  $t \in [0, T]$ . La discretización de  $f$  será representada por la matriz  $QT$ . Trataremos a  $f$  dependiente del tiempo, ya que en principio las fuentes de contaminantes corresponden a la posición de los autos a cada tiempo  $t$ .

El algoritmo requiere generar un arreglo  $QT$  que es un vector de matrices  $Q$ , se lleva a cabo traduciendo la posición de las fuentes, que aquí consideraremos puntuales. Supongamos  $\alpha$  es el número de agentes y que conocemos la trayectoria de cada uno. Por lo tanto se puede

### 5.3. FUENTES DE CONTAMINANTES

discretizar dichas trayectorias en vectores  $x_k$ , y a su vez las  $\alpha$  trayectorias forman un vector  $XT$  que contiene los vectores individuales, es decir:

$$XT = [x_1, \dots, x_\alpha],$$

donde

$$x_k = [x_k(t_0), \dots, x_k(t_T)] \quad \text{con } k \in [1, \dots, \alpha],$$

$x_k(t_n)$  corresponde a la posición de la partícula  $x_k$  al tiempo  $t_n$ , simplemente la representamos por  $x_{k,n}$ . De esto podemos calcular  $Q$  para un agente  $k$  ( $Q_k$ ; esta matriz es la discretización de la contribución de la fuente de contaminante  $k$  a la función  $f$ ). Calculamos  $Q_k$  asignado un valor de 1 al nodo más cercano de malla (Fig. 5.4) según la función:

$$q_{k,n}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in [x_{k,n}[1] - l/2, x_{k,n}[1] + l/2] \times [x_{k,n}[2] - k/2, x_{k,n}[2] + k/2] \\ 0 & \text{e.o.c.} \end{cases}$$

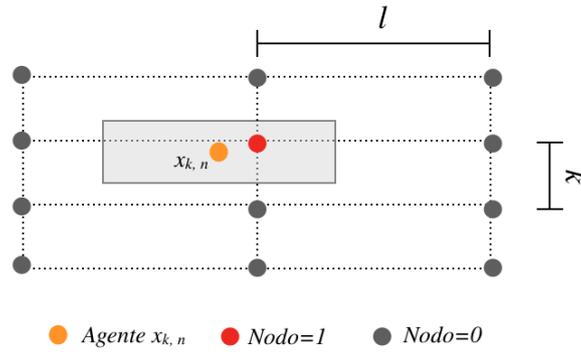


Figura 5.4: Representación de la función  $q_{k,n}(x)$

Así se puede representar a  $Q_k$  como:

$$Q_k = [Q_k(t_0), \dots, Q_k(t_T)],$$

y por lo tanto

$$QT = \sum_{k=1}^{\alpha} Q_k,$$

## 5.4. IMPLEMENTACIÓN

que en resumen es la discretización de  $f(x, t)$  sobre el dominio  $\Omega$  debido a las trayectorias de los agentes  $x_k$ ; siendo  $QT^n$  la discretización de  $f(x, t_n)$ .

### 5.4 Implementación

Supongamos que hemos generado la información necesaria para realizar los cálculos numéricos ( $X, Y, \Omega_{i,j}, XT, QT, u^0$ ) entonces se procede a la implementación del algoritmo para el cálculo de  $u_{i,j}^n$ . Fig

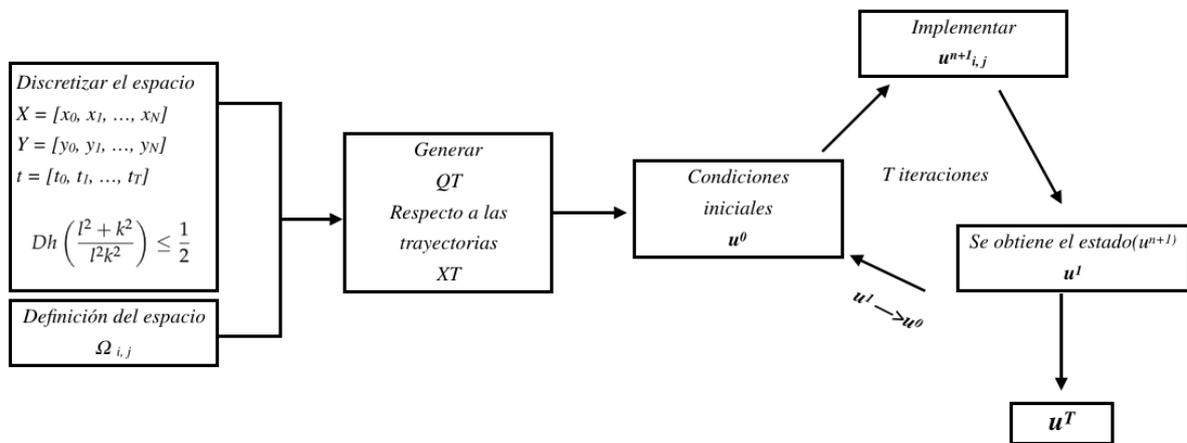


Figura 5.5: Diagrama de implementación del algoritmo

En la Fig. 5.6 se tiene el pseudocódigo del algoritmo que calcula la transición de  $u^n$  a  $u^{n+1}$ .

Además de poder manejar espacios arbitrarios 2D, la forma en la que se implementa el algoritmo tiene otras ventajas. Notemos que en realidad en la función **paso difusión** se puede tener cualquier distribución  $QT$  que no necesariamente depende de las trayectorias  $XT$ , en particular si  $QT = [0]$  entonces se recupera la ecuación homogénea; además nos permite tomar diferentes valores de  $h$  en cada paso de tiempo, por lo cual se podrían incluir un método adaptativo, siempre y cuando cumpla con (4.12).

El algoritmo fue desarrollado en el lenguaje Julia. [35]

#### 5.4. IMPLEMENTACIÓN

```
function paso_difusion(un, Ω, X, Y, QTn, D, h)
    #esta función calcula un+1 en todo el espacio discreto de Ω, para
    #un paso de tiempo h y constante de difusión D

    #para poder introducir los nodos imaginarios
    un = rodear(un,0)
    Ω = rodear(Ω,0)
    QTn = rodear(QTn,0)

    #Se calcula un+1[i,j] en toda la malla
    for j in 1:M
        for i in 1:N

            if Ω[i,j] ∈ intΩ
                do calculate(un+1[i,j]) #from un, QTn

            elseif Ω[i,j] ∈ ∂Ω(Neumann)
                do identifica el vector normal en el nodo Ω[i,j]
                do sustituye el valor del nodo imaginario
                do calculate(un+1[i,j])

            elseif Ω[i,j] ∈ ∂Ω(Periódica)
                do identifica el vector normal en el nodo Ω[i,j]
                do sustituye el valor del nodo imaginario
                do calculate(un+1[i,j])

            elseif Ω[i,j] ∉ intΩ
                do un+1[i,j]=0
            end
        end
    end

    #Se obtiene un+1 sin tomar en cuenta los nodos imaginarios
    return un+1[2:N-1,2:M-1]
end
```

Figura 5.6: Pseudocódigo del algoritmo que calcula la evolución de  $u^n$  a  $u^{n+1}$

# 6 | Resultados

## 6.1 Estado inicial aleatorio

A partir de esta simulación se observó el correcto funcionamiento del algoritmo, ya que debe reproducir correctamente las características de la ecuación de difusión previamente discutidas. El problema es:

$$\begin{cases} u_t - D(u_{xx} + u_{yy}) = 0; \\ u(x, y, 0) = g(x, y) \\ \frac{\partial u}{\partial n}(x, y, t) = 0 \end{cases}$$

con  $(x, y) \in \Omega = [-10, 10] \times [-10, 10]$ ,  $t \in [0, \infty)$  y  $D = 0.1$ , con unidades arbitrarias. El estado inicial  $g(x, y)$  es aleatorio que toma valores en el intervalo  $[0, 1]$ , el esquema explícito utilizado (4.11) nos permite calcular la evolución de este tipo de estados iniciales discontinuos. Las condiciones de frontera son de tipo Neumann, completamente reflejantes, es decir,  $R = 1.0$  (coeficiente de reflexión). Además, la ecuación es la correspondiente a la homogénea, por lo tanto no se tienen fuentes de contaminantes.

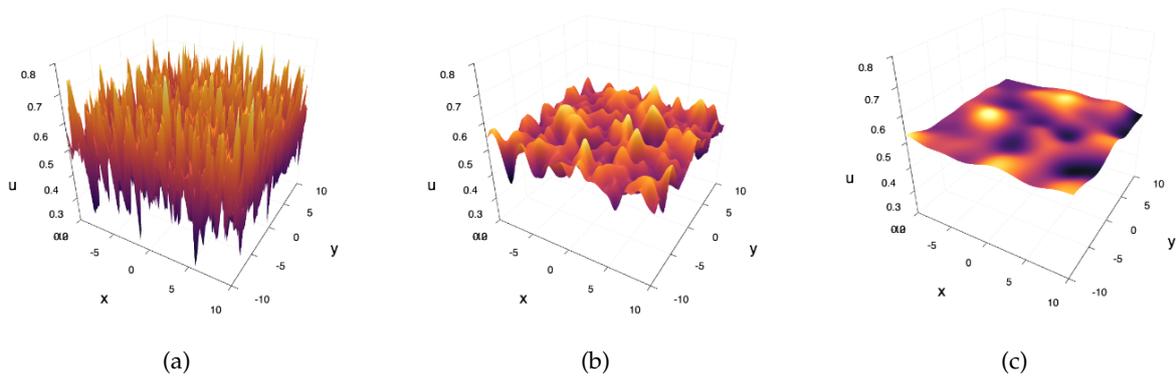


Figura 6.1: Evolución del estado inicial aleatorio (a)  $t=0.15$ , (b)  $t=1.25$  y (c)  $t=12.5$

Implementando el algoritmo, se considera los valores de  $k = l = 0.2$  y  $h = 0.05$ , estos valores con  $D = 0.1$  satisfacen (4.12). En la Fig. 6.1 se observa gráficamente la evolución de

## 6.2. OBSTÁCULOS ALEATORIOS CON UNA FUENTE MÓVIL

$g(x, y)$  a través del tiempo.

Se observaron las características descritas por la solución fundamental (3.6), a tiempos cercanos a  $t = 0$  los cambios son más bruscos. Adicionalmente, aunque el estado inicial es discontinuo (con picos), para tiempos mayores  $u$  es suave.

Notemos que la condición inicial  $g(x)$  esta formada por picos, lo cual puede representar un problema de acuerdo a las condiciones de unicidad y estabilidad ya que no es de clase  $C^2$ , sin embargo por [23][24] sabemos que la solución es suave y convergente.

De este problema se encontraron criterios para determinar cualitativamente el tiempo de equilibrio (o de relajación)  $t_e$ , tal que para todo  $t > t_e$  el estado no cambia o sus cambios son pequeños comparados con los de  $t < t_e$ . Esto corresponde a tener un estado numéricamente cercano al estacionario para  $u$  para tiempos mayores a  $t_e$ .

Los criterios son: el análisis del histograma de los valores que toma  $u$  y el valor promedio de  $u$ . Para este caso determinamos que  $t_e = 17$

## 6.2 Obstáculos aleatorios con una fuente móvil

En este problema consiste en un espacio  $\Omega$  cuadrado en el cual se introducen bloques rectangulares al interior cuyas fronteras son tanto reflejantes como absorbentes. Se considera una fuente móvil tal que  $f(x, y, t) = 1$  con  $(x, y) = (v_x t - x_0, y_{cte})$ , es decir la fuente tiene movimiento a lo largo de  $x$ , mientras que  $y$  permanece constante. La condición inicial es  $u(x, y, 0) = 0$ .

A partir del problema de obstáculos aleatorios con una fuente móvil, se llegaron a distintos resultados acerca de las fronteras:

- Sin fronteras absorbentes no se encontró  $t_e$ . Esto se debe a que al tener solo fronteras reflejantes, la cantidad de contaminantes siempre crece debido a la fuente.
- Al aumentar el número de fronteras absorbentes el  $t_e$  disminuye al igual que el valor promedio de  $u(x, y)$ .
- A menor  $R$  (coeficiente de reflexión), menor es el valor promedio de  $u$  a través del tiempo, esto para un número fijo de bloques con fronteras reflejantes.
- Existe un  $R_c$  (coeficiente de reflexión crítico) tal que para  $R > R_c$  al aumentar las fronteras reflejantes los valores de  $u$  aumentan, ocurre lo contrario para  $R < R_c$ .

## 6.2. OBSTÁCULOS ALEATORIOS CON UNA FUENTE MÓVIL

- Al disminuir el valor  $R$ , las distribuciones son más suaves.

Analizando cualitativamente los valores de  $R$ , se determinó que  $R = 0.8$  es un coeficiente adecuado para que  $t_e$  tenga tiempos razonables de acuerdo al número de iteraciones realizadas, al igual del comportamiento adecuado en los indicadores (valores del histograma y el valor promedio de  $u$ ).

Naturalmente el tener una discretización más fina (mayor número de nodos) en el espacio aproxima de mejor manera el problema de difusión, lo cual se debe a (4.13). Se realizaron distintas pruebas usando los obstáculos aleatorios y se observó que a medida que sea más fina la malla del espacio discreto, más suave es la gráfica de la solución numérica. Además, la evolución de un mismo problema inicial para distintas discretizaciones es similar, siempre y cuando cumplan la condición de estabilidad (4.12).

A continuación se mostrarán los resultados para  $\Omega = [0, 200] \times [-40, 40]$ ,  $v_x = 0.8$  con condiciones periódicas de la fuente dada por  $x(t) = \text{mod}(v_x t, 200)$  (al llegar a  $x = 200$  el coche regresa al punto  $x = 100$ );  $h = 1.0$ ,  $k = 1.0$ ,  $l = 0.8$ ,  $D = 0.15$  y  $R = 0.8$  con 30 obstáculos reflejantes y 20 absorbentes (ver Fig. 6.2). De nuevo, se tomaron unidades arbitrarias.

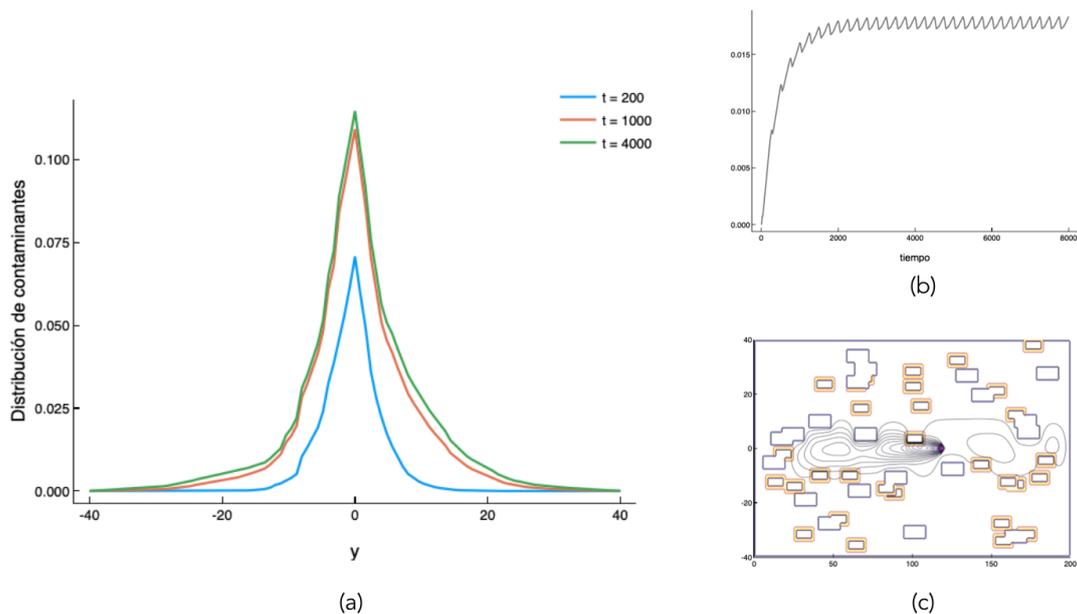


Figura 6.2: (a) Distribución de contaminantes sobre el eje  $y$  (que es el eje perpendicular al flujo) para  $t = 200, 1000, 4000$ , (b) gráfica de valor promedio de  $u$  a través del tiempo y (c) visualización de  $u(x, y)$  para  $t = 4000$  en el respectivo espacio  $\Omega$  con obstáculos reflejantes y absorbentes aleatorios.

Notemos que las distribuciones no son gaussianas, si no que decaen similar a una exponen-

## 6.2. OBSTÁCULOS ALEATORIOS CON UNA FUENTE MÓVIL

cial, lo cual es consistente a los problemas de nacimiento-muerte.

El valor promedio de  $u$  (Fig. 6.2 (b)) tiene un comportamiento de diente de sierra, esto se debe al tránsito periódico de la fuente y como interactúa con las fronteras. Se determinó a partir de los indicadores que  $t_e = 4000$ , por lo que para tiempos mayores a  $t_e$  la distribución  $y$  cambia en un rango mínimo. Lo mismo ocurre para la distribución sobre  $x$ , sin embargo, es de nuestro interés la distribución en  $y$  ya que corresponde a la dirección perpendicular al flujo de fuentes de contaminantes. En este espacio  $R_c \approx 0.85$

La distribución de equilibrio claramente debe depender de la cantidad de contaminantes que emite la fuente  $f$ , sin embargo se analizó la normalización de esta distribución ( $X$ )

$$X_{norm} = \frac{X}{\sum X_i}.$$

Se observó que: dos problemas sujetos a las mismas condiciones (dominio, condiciones iniciales, condiciones de frontera e igual discretización), y con las contribuciones no homogéneas  $f_1$  y  $f_2$  tales que  $f_1(x, y, t) = \alpha f_2(x, y, t) \forall x, y, t \in \Omega \times [0, \infty)$  donde  $\alpha \in R$ , entonces ambos problemas convergen a la misma distribución normalizada, es decir, las distribuciones de equilibrio tienen la misma forma.

Los coeficientes de difusión  $D$  para contaminantes en el aire son del orden de  $10^{-5} m^2/s$  que permiten utilizar tiempos grandes, que de acuerdo a (4.12) son del orden de  $10^4$  s, sin embargo no es posible tomar los correspondientes valores de  $h$  ya que se pierde gran parte de la información de las trayectorias, como consecuencia la simulación sería muy tardada. A partir del análisis de la distribución normalizada se obtuvo que dos problemas con una fuente no móvil  $f = f(x, y)$  (o sin fuentes) que tienen la misma discretización del espacio, del tiempo y con mismo coeficiente  $D$  satisfacen:

$$D_1 h_1 = D_2 h_2,$$

entonces ambos problemas convergen a las mismas distribuciones normalizadas. Esto permite realizar simulaciones que no pierdan información y el costo de tiempo es mucho menor al que se tendría con los primeros valores  $D_1$  y  $h_1$ ; notemos que la distribución de equilibrio no normalizada conserva la forma de la distribución de equilibrio original. Por la linealidad de la ecuación de difusión esto también se cumple para fuentes móviles, pensando que cada paso de tiempo se genera un estado inicial correspondiente a la posición de la fuente.

## 6.3 Flujo en una red de calles

En este punto nos podemos preguntar cómo son las distribuciones en las calles de una ciudad y con esto saber la cantidad de contaminantes a la que se exponen las personas, en particular los ciclistas.

Para esto consideramos dos casos: el cambio en el nivel de contaminantes respecto al flujo de fuentes (móviles) y el cambio respecto a la cantidad de carriles (ancho de la calle de flujo).

El análisis se produjo en un espacio que consta de una red de 7x6 cuadras (cada una de 120m x120m) en 1km de largo y 1 km de ancho. Las cuadras están descritas por bloques de fronteras reflejantes con  $R = 0.8$  que funcionan como edificios. Las calles aledañas tienen una separación de 20 m entre sí. También se introdujeron aleatoriamente cuadras con fronteras de absorción total (que podrían describir parques). Las velocidades consideradas se tomaron aleatoriamente entre 30 y 60 km/hr.

Para el primer caso se analizaron los flujos de 5, 20, 35, 50, 65, 80, 95 y 110 autos/minuto; los autos se mueven sobre una calle de flujo, la cual es de 4 carriles con 60 m de ancho. El flujo de los autos es en ambos sentidos.

En la Figura 6.3 se muestran las distribuciones de los contaminantes en dirección transversal al flujo señaladas por la línea roja (sobre una calle) y la azul (sobre las construcciones); ambos casos muestran resultados similares y si bien se observa una curva suave en el caso de la distribución sobre la calle, los niveles de contaminantes son casi idénticos y además decaen muy rápido lo cual ya se esperaba por el comportamiento de la ecuación de difusión. La gráfica del valor máximo en la distribución (que corresponde al centro de la calle de flujo) muestra un crecimiento lineal respecto al flujo de autos, lo cual es un buen indicador para implementar espacios como ciclovías o andadores en calles con menor flujo de autos.

Pensando en la pregunta ¿qué tanto deberíamos de alejarnos de una calle con alto tránsito?, la Figura 6.4 muestra como es la distribución sobre la calle de flujo y en dos calles paralelas. Por supuesto hay mayor contaminación sobre las calles que cruzan ya que no hay objetos que absorban u obstruyan su paso. Además en la segunda imagen se observa la magnitud de los niveles de contaminantes, disminuyendo en cuatro y seis órdenes de magnitud a una calle y dos calles de distancia respectivamente. En este sentido se puede asegurar que es suficiente alejarnos una calle de distancia. En la implementación de ciclovías, es muy conveniente construirlas fuera de una calle o avenida de alto tránsito.

Para el segundo caso, se utilizó las mismas características del espacio. Se utilizaron las calles de flujo de 1, 2, 4 y 6 carriles con 20, 40, 60 y 80 m de ancho respectivamente. En los

### 6.3. FLUJO EN UNA RED DE CALLES

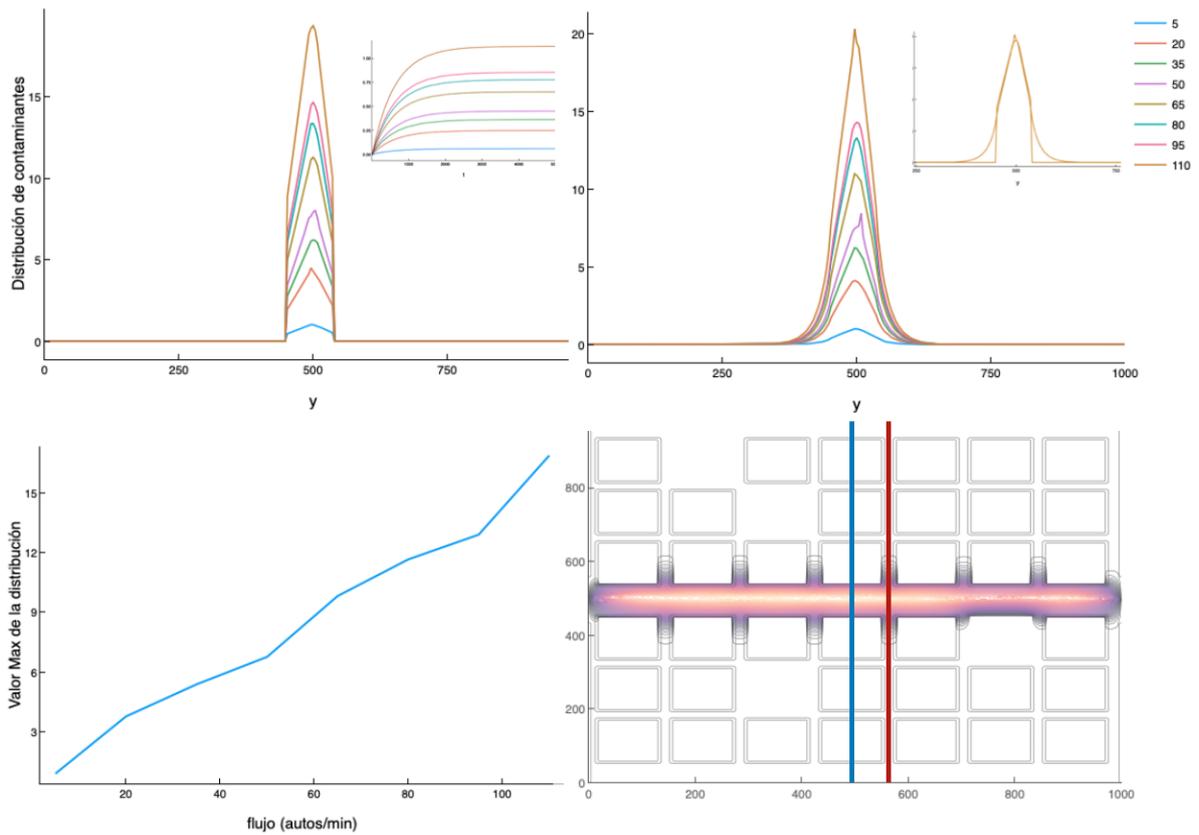


Figura 6.3: Distribución de contaminantes respecto al flujo de autos. Se muestran los niveles en la dirección perpendicular al flujo (de acuerdo a la línea azul y roja de la última figura) y el valor máximo en función del flujo.

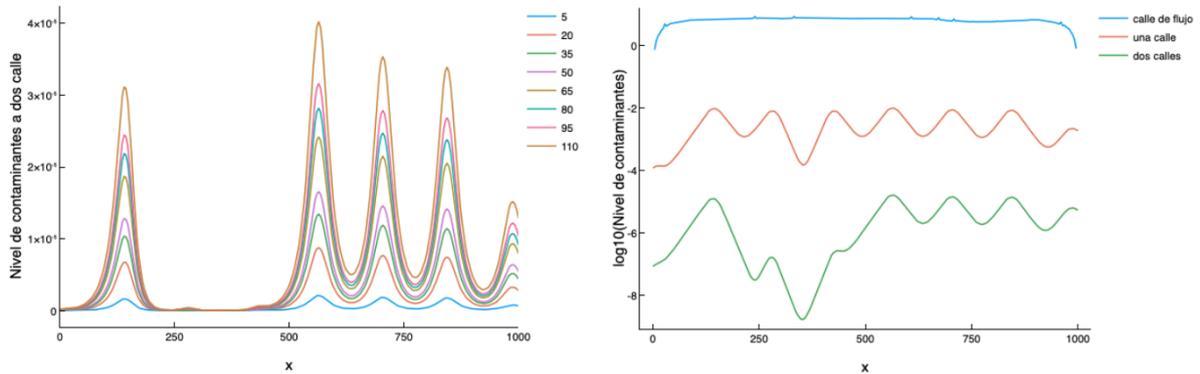


Figura 6.4: Distribución de contaminantes paralelos al flujo de fuentes.

### 6.3. FLUJO EN UNA RED DE CALLES

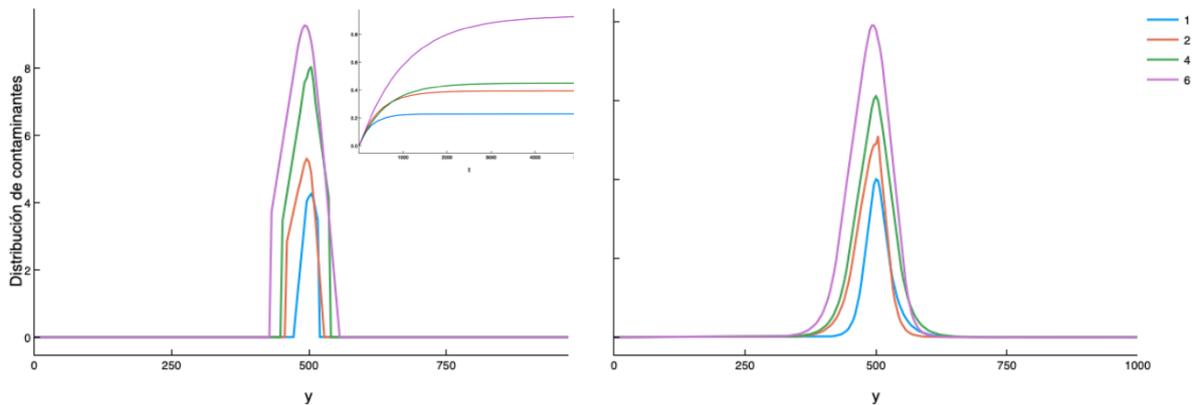


Figura 6.5: Distribución de contaminantes en dirección perpendicular al flujo respecto al número de carriles (ancho de la calle)

cuatro casos el flujo es de 50 autos/min. Los resultados se muestran en la Figura 6.5. La forma es similar al primer caso (la distribución es suave sobre una calle perpendicular). Lo que más importa en este caso es que los niveles aumentan conforme el número de calles aumenta, es decir, una calle más ancha permite mayor acumulación de contaminantes.

Adicionalmente se observó que las calles alrededor de las fronteras absorbentes tienen en promedio un 30% menos contaminantes que una equivalente (misma distancia de la calle principal) con fronteras reflejantes. Recordemos únicamente se tomaron en cuenta fronteras reflejantes con  $R = 0.8$  y las absorbentes son de absorbencia total  $R = 0$ . Esto sugiere que los niveles de contaminantes son menores alrededor de los parques, por lo tanto es conveniente la construcción de ciclovías cerca de los parques. Adicionalmente se argumenta la necesidad de tener parques cerca de las vías con mayor circulación.

Al no considerar el caso 3D se está ignorando la difusión de contaminantes en el eje vertical, lo cual puede propagar los contaminantes a las calles aledañas cruzando los edificios, los parques, u otros obstáculos. Por otro lado tampoco se consideraron flujos de viento, ni el movimiento de los autos que contribuyen en una parte de advección al modelo. Posiblemente lo que ocurriría en estos casos es que las distribuciones de contaminantes serían más homogéneas; dicho esto, tendríamos que las calles aledañas tendrían, en el peor de los casos, la misma concentración de contaminantes que en las calles de altos flujos (calles principales). Además, como sabemos los riesgos de un ciclista al transitar en avenidas principales son mayores (de acuerdo a la Fig. 1.3).

Estos son los resultados más importantes de la simulación de difusión. A continuación presentaremos lo correspondiente al modelo de adsorción de Langmuir de acuerdo a la

#### 6.4. ADSORCIÓN DE LANGMUIR

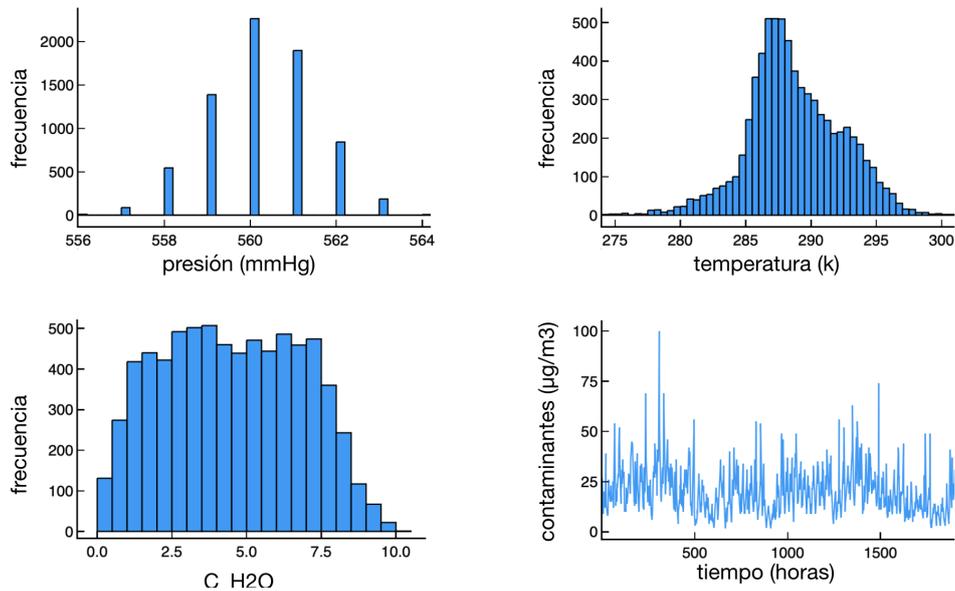


Figura 6.6: Visualización de datos para  $PM_{CO}$  en la estación Ajusco Medio

información de contaminantes en el Valle de México.

#### 6.4 Adsorción de Langmuir

Se analizaron los datos correspondientes en 6 estaciones dentro de la zona metropolitana del Valle de México, las cuales contienen la información requerida para el análisis (presión, temperatura, humedad, cantidad de contaminantes). Las estaciones son: Ajusco Medio (AJM), Cuautitlán (CUT), Hospital General de México (HGM), Merced (MER), Tlalnepantla (TLA) y Xalostoc (XAL), datos disponibles en [36]. Los contaminantes registrados corresponden a las partículas y/o moléculas de  $CO$ ,  $NO$ ,  $NO_2$ ,  $NO_x$ ,  $O_3$ , partículas de diámetro menor a 2.5 micras  $PM_{2.5}$ , menores a 10 micras  $PM_{2.5}$ , partículas gruesas mayores a 10 micras  $PM_{CO}$  y  $SO_2$ . Los datos corresponden al año 2018 y fueron registrados cada hora. En la Fig. (6.6) se muestran los datos del  $PM_{CO}$  para la estación Ajusco Medio.

En la Fig. 6.6 se muestran los datos del  $PM_{CO}$  para la estación Ajusco Medio. Los valores que toma para la presión atmosférica son pocos mientras que la temperatura tiene un rango mayor, en el cual los datos se encuentran en su mayoría entre 280 y 295 K.

Los términos correspondientes de la fracción de ocupación (2.5) están dados en términos de la cantidad de contaminantes y la cantidad de agua en el ambiente. Así, suponiendo que cada día se produce la misma cantidad de cada uno de los contaminantes ( $\eta_{max}$ ) entonces

#### 6.4. ADSORCIÓN DE LANGMUIR

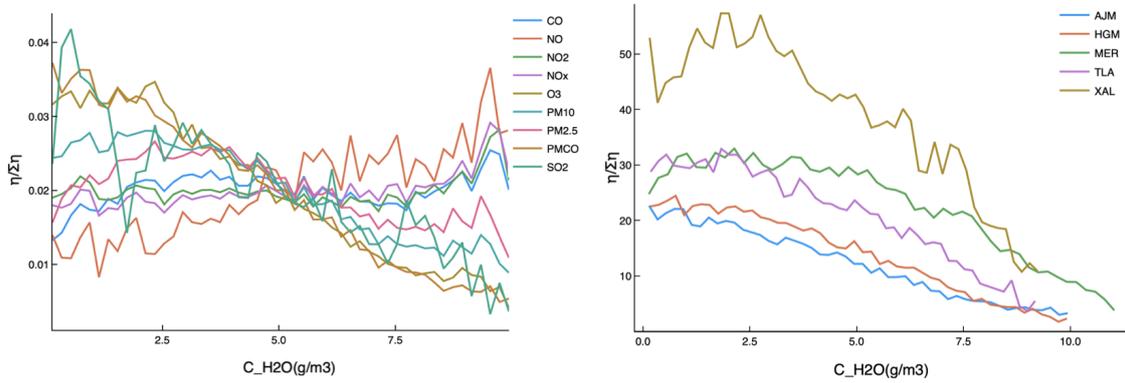


Figura 6.7: Gráfica de  $\eta / \sum(\eta)$  en función de  $C_{H_2O}$  de los distintos contaminantes. En la parte derecha se muestra la gráfica de  $PM_{CO}$  para las estaciones que registraban éste contaminante.

para cada registro de contaminantes ( $\eta$ ) y la cantidad de agua correspondiente a la ecuación (2.7) la fracción de ocupación está dada por:

$$f = \frac{\langle N_a \rangle}{N_s} = \frac{\eta_{max} - \eta}{C_{H_2O}} \quad (6.1)$$

De (2.6) se deduce que, para una  $T$  dada, la cantidad de contaminantes es lineal respecto a la  $C_{H_2O}$  (2.7) con pendiente  $p/(p_0 + p)$  (que puede ser tanto positiva como negativa); donde la presión parcial del aire corresponde a la presión atmosférica ( $p = p_{atm}$ ). Ver Fig. 6.7

$$\eta = -C_{H_2O} \left[ \frac{p_{atm}}{p_0 + p_{atm}} \right] + \eta_{max}.$$

El valor de las moléculas PM,  $O_3$  y  $SO_2$  disminuyen al aumento de la humedad, sin embargo hay diferencias entre éstas. Las partículas  $PM_{CO}$  y  $SO_2$  disminuyen sus valores para  $C_{H_2O}$  cercanos a cero, mientras que  $PM_{2.5}$ ,  $PM_{10}$ ,  $O_3$  disminuyen a partir de 350 , 250, 250 respectivamente. Las razones son desconocidas, sin embargo las principales causas están relacionadas con el tamaño de las partículas y su interacción con el agua que a su vez dependen de otras variables termodinámicas como la temperatura. Los óxidos de nitrógeno tienden a aumentar conforme aumenta la  $C_{H_2O}$ , esto debido a sus reacciones químicas con el agua, por ejemplo  $3NO_2 + H_2O \rightarrow 2HNO_3 + NO$ ; de hecho se observa que la molécula con mayor aumento es  $NO$ . Por último, el comportamiento de  $CO$  no es claro cómo depende de la humedad, sin embargo en algunas estaciones HGM, TLA y XAL, aumenta hasta los  $C_{H_2O} = 250g/m^3$  y después sus valores se mantienen estables, lo cual podría indicar que a

#### 6.4. ADSORCIÓN DE LANGMUIR

humedades bajas hay producción de CO hasta llegar a un equilibrio entre CO y la cantidad de agua en el ambiente.

Es importante mencionar las observaciones entre las estaciones. Estaciones como la Merced parecen saturarse de contaminantes ya que a poca humedad los niveles de contaminantes no disminuyen, si no hasta un valor de  $C_{H_2O}$  cercano a 250. En contraste la estación del Ajusco Medio disminuye desde los primeros valores registrados como lo muestra la Figura 6.7.

Al tener pocos valores de las presiones (ver Fig. 6.6 no es razonable utilizar esta variable para el modelo de Langmuir como comúnmente se hace, por lo tanto se decidió utilizar la temperatura como variable a presión constante ( $p_{atm} = \langle p \rangle$ ), de acuerdo a (2.6):

$$f = \frac{p_{atm}}{aT^{5/2}e^{b/T} + p_{atm}},$$

a, b son los parámetros a ajustar a los datos experimentales. El parámetro a en principio está relacionada con la concentración cuántica  $n_Q$  y por lo tanto se relaciona con las masas del material de la superficie adsorbente y de la masa del contaminante; por otra parte, el parámetro b se relaciona con el potencial químico, es decir, depende de la energía que cuesta atrapar un contaminante por la superficie de las gotas de agua. El modelo de Langmuir supone que cada molécula del sólido atrapa una molécula del gas, lo cual puede ser mejorado por un factor que nos indique cuantas moléculas de agua (en este caso) se necesitan para atrapar un agente contaminante. Esto último lo implementamos multiplicando la ecuación anterior por un tercer parámetro c:

$$f = c \frac{p_{atm}}{aT^{5/2}e^{b/T} + p_{atm}} \quad (6.2)$$

Se calcularon los parámetros para cada estación y contaminante. Los resultados se muestran en la Tabla 6.1.

Los valores del parámetro a son negativos y de magnitud similar. Como ya se había comentado, en el modelo de Langmuir este parámetro está relacionado con la concentración cuántica del agua y del contaminante (2.6), por lo tanto este valor debería ser positivo, lo cual no ocurre en nuestros ajustes. Igualmente, el parámetro b tiene una magnitud similar para todos los contaminantes y a excepción del O<sub>3</sub> todos son positivos, lo que muestra que la adsorción de una partícula o molécula por el agua cuesta energía (posiblemente relacionada con la tensión superficial). El caso de O<sub>3</sub> en realidad no podríamos decir que es distinto, simplemente se utilizó el valor negativo ya que éste ajustaba un poco mejor; en caso de que el valor fuese necesariamente negativo, esto nos habla de una molécula polar lo que sugiere que solubilidad en el agua es mayor, por lo cual no cuesta energía ser adsorbida por el agua,

#### 6.4. ADSORCIÓN DE LANGMUIR

Contaminante	a (e-4)	b	c	$\sigma$ (error)
CO	-2.4812697	117.658055	8.2235954e-5	2.022168e-4
NO	-2.4305969	124.830672	7.9001215e-3	1.887116e-2
NO2	-1.7988509	215.549694	2.8811311e-3	9.021938e-3
NOX	-1.5947529	251.770151	7.9522100e-3	2.473781e-2
O3	-4.0477889	-31.823439	6.5491815e-3	2.567344e-2
PM10	-2.2257177	149.560465	6.6761963e-6	1.599937e-5
PM2.5	-3.4214519	20.0541400	4.8552431e-6	9.517926e-6
PMCO	-1.8780373	199.556575	3.9792111e-6	1.008731e-5
SO2	-2.6766274	95.1547506	1.0146542e-2	2.513832e-2

Tabla 6.1: Parámetros de ajuste del modelo de Langmuir, correspondientes al promedio de las estaciones

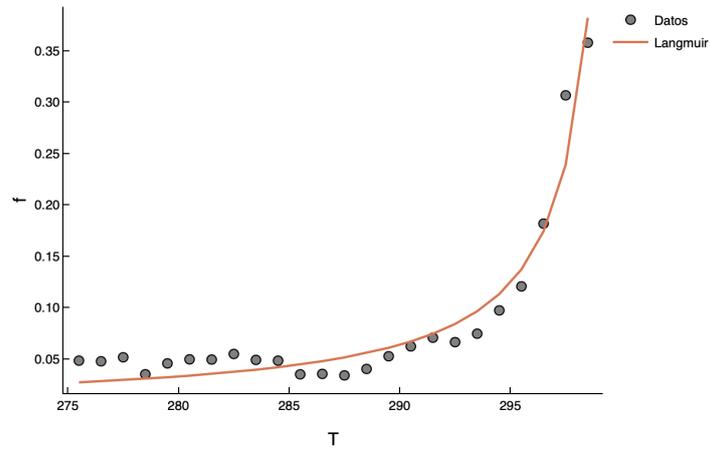
incluso puede ser absorbida fácilmente al interior de las gotas de agua. El parámetro  $c$  sí parece estar relacionado con el tamaño de las partículas, ya que se tiene una menor fracción de ocupación, por ejemplo, para las partículas grandes o con mayor masa como las PMs y CO. Finalmente los valores de  $\sigma$  indican la desviación estándar del error entre de los datos experimentales y el ajuste para el modelo de Langmuir.

La Figura 6.8 muestra el comportamiento de la fracción de ocupación de acuerdo a los datos, en este caso, de la estación Ajusco Medio. El comportamiento es similar para el resto de las estaciones. Se observa en la Figura 6.8 (a) que el modelo de Langmuir tiene buena aproximación de los datos experimentales (hasta cierto punto), conservando una curva de tendencia descrita por los parámetros asociados a (6.2) y a su vez corrobora que sí existe una dependencia entre el nivel de contaminantes y la humedad.

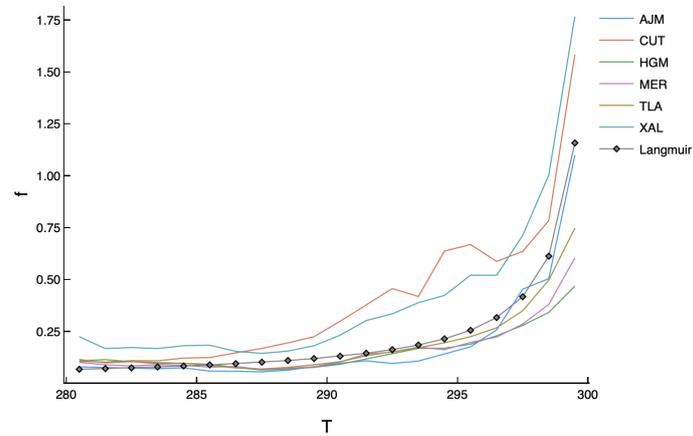
Por otro lado en la Figura 6.8 (b) se observa que las gráficas de los datos experimentales tienen el mismo comportamiento (para cada uno de los contaminantes) respecto a  $T$ , el cual describe una pequeña disminución de  $f$  hasta los 283 K. Aún más interesante es lo que ocurre en los intervalos de temperatura de 283 a 290 K y de 290 a 295 K en los cuales se tiene un comportamiento bien definido, que no corresponde al modelo de Langmuir, ya que éste sólo reproduce los términos exponenciales. Esto indica que el modelo propuesto y analizado no es suficiente; sin embargo, el reproducir la curva de tendencia indica que hay ciertas características que coinciden, principalmente la adsorción (o posiblemente absorción) y la dependencia lineal del nivel de los contaminantes respecto a la cantidad de agua o humedad.

Han sido varias, o mejor dicho demasiadas, las suposiciones al implementar el modelo de Langmuir, sin mencionar las características de la atmósfera, que como sabemos es un sistema que depende de muchas otras variables que no se consideraron y otras que no son

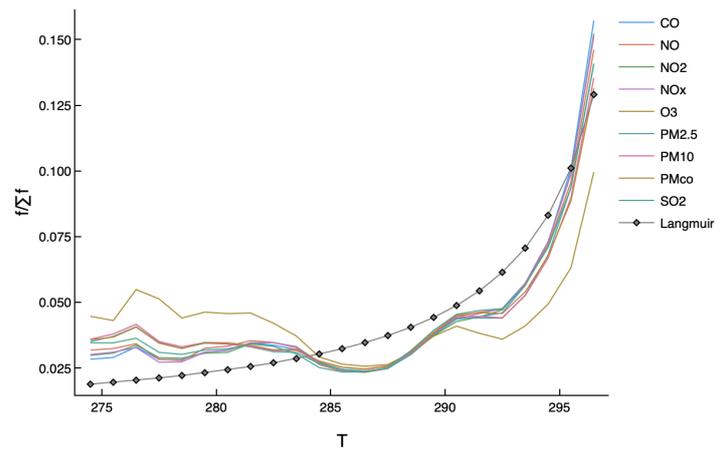
#### 6.4. ADSORCIÓN DE LANGMUIR



(a)



(b)



(c)

Figura 6.8: (a) Ajuste de la fracción de ocupación  $f(T)$  ec. (6.2) de PM10 en AJM de acuerdo a la ec. (6.1). Visualización de  $f(T)$  de PM10 en 6 estaciones. (c) Visualización de la  $f(T)$  de todos los contaminantes en AJM

#### 6.4. ADSORCIÓN DE LANGMUIR

posibles considerar, de hecho sólo hemos considerado las variables de presión, temperatura, nivel de contaminantes y humedad. Existen otros puntos cruciales a considerar dentro del modelo y posiblemente mejorar, como el saber la superficie total de agua en estado líquido (gotas) en el ambiente (ya que hemos utilizado únicamente una proporción de la cantidad de gotas), además para el análisis de cada contaminante se supone que sólo hay un tipo de partículas por ser absorbidas, al tomar más de un tipo de moléculas por adsorber la fracción de ocupación (??) debe ser modificada. Tampoco hemos analizado la dependencia entre nuestras variables, ya que en un espacio abierto como la atmósfera (o incluso cerrado y controlado) hay correlaciones entre una variable y la otra; existe la posibilidad de que los comportamientos ya mencionados para  $f(T)$  puedan ser descritos o mejor aproximados por dichas correlaciones termodinámicas.

Considerando lo anterior, se puede sugerir un experimento en el cual se tengan las variables controladas. Sin duda los resultados ayudarían a conocer y entender más el fenómeno de la interacción de los gases contaminantes y la humedad presente en el aire, independientemente de si este puede ser descrito o no por el modelo de Langmuir.

## 7 | Conclusiones

El primer resultado de este trabajo es el desarrollo de un algoritmo para resolver la ecuación de difusión 2-dimensional no homogénea (3.3), con fuentes móviles y en espacios arbitrarios, en el sentido de incluir fronteras de distintos tipos. Esto a partir del método de diferencias finitas. El algoritmo reproduce correctamente las características de la ecuación de difusión, lo que implica que la solución numérica (resultado del algoritmo) sí aproxima la solución de la ecuación de difusión.

Las limitaciones principales del modelo son: considerar un caso 2D despreciando la difusión en el eje vertical y no considerar los flujos de viento ni el propio movimiento de los autos que modificarían la ecuación con una contribución de advección. Ambos casos implican mayor difusión de contaminantes en las calles aledañas.

Es de nuestro interés encontrar el estado estacionario al que converge un problema cualquiera de la ecuación de difusión. Para esto se encontraron criterios cualitativos (el valor promedio de  $u(t)$  y el histograma de sus valores que toma  $u$ ) los cuales permiten estimar un tiempo de equilibrio  $t_e$ , tal que para  $t > t_e$  el estado  $u(x, y, t)$  es cercano al estado de equilibrio (en  $t = \infty$ ). Se esperaba encontrar el estado estacionario, que permite saber las distribuciones de equilibrio asociadas a  $u$ , debido a las fronteras absorbente y parcialmente reflejantes.

Al incluir fuentes (de contaminantes) se obtuvieron distintos resultados referentes a las fronteras, mencionando los más importantes se tienen: a mayor número de fronteras reflejantes menor es el tiempo  $t_e$  y disminuyen los valores de  $u$ , las fronteras reflejantes tienen distintos comportamientos de acuerdo al coeficiente de reflexión y sería interesante indagar más. A partir de un análisis se determinó que el coeficiente de reflexión de las fronteras reflejantes  $R = 0.8$  es adecuado para que  $t_e$  tenga tiempos razonables de acuerdo al número de iteraciones realizadas.

Principalmente nos interesaría saber la distribuciones de equilibrio de los contaminantes, sin embargo el análisis se dificulta al implementar espacios con las dimensiones reales (de calles) con las unidades correspondientes al coeficiente de difusión  $D \sim 10^{-5} m^2/s$ . De este problema se encontró un método que permite llegar a una distribución de equilibrio equivalente a la de unidades reales, ésta distribución equivalente no tiene los mismos valores

pero sí contiene la información de como se distribuyen los contaminantes ya que tiene la misma forma (de hecho ambas distribuciones normalizadas son iguales).

Posteriormente se implemento el algoritmo para distintos flujos de autos en una red de calles, obteniendo como principales resultados: un flujo mayor de autos representa una mayor exposición a los contaminantes sobre la vía principal (vía donde se encuentra el flujo de autos), lo mismo ocurre con el número de carriles, es decir, con más carriles mayor es el nivel de contaminantes. También se encontró que las calles que rodean a un parque (constan de fronteras absorbentes) disminuyen su nivel de contaminantes alrededor de 30%; finalmente se encontró que a una cuadra de distancia de la calle principal el nivel de contaminantes disminuye significativamente, entre 2 y 4 ordenes de magnitud.

Por otro lado mencionaremos lo correspondiente al modelo de Langmuir. En la mayoría de los contaminantes analizados, se observó la dependencia lineal del nivel de contaminantes ( $\eta$ ) respecto a la cantidad de agua en forma de gotas en el ambiente ( $C_{H_2O}$ ). Las partículas PM y el Ozono claramente disminuyen al aumentar la cantidad de agua en el ambiente; lo opuesto ocurre para los óxidos de nitrógeno debido a la mayor producción de estos de acuerdo a las reacciones químicas.

A partir de los datos experimentales se logró definir a la fracción de ocupación  $f$  (o un equivalente), en función de los niveles de contaminantes registrados y la cantidad de agua en estado líquido en el aire (6.1). De esto se determinaron aspectos del modelo de Langmuir. Si bien los ajustes correspondientes a la ecuación 6.2 (Tabla 6.1) reproducen una curva de tendencia de  $f(T)$ , el modelo no describe el comportamiento real y muy interesante que se tiene en  $T = [283, 295]$  (se observan curvas bien definidas para todos los contaminantes en la Fig. 6.8 (c)) y difícilmente lo hará (pensando incluir correlaciones entre las variables termodinámicas u otras mejoras al modelo). Esto indica que el modelo propuesto y analizado no es suficiente como era de esperarse, ya que éste describe únicamente la interacción (adsorción) de un cristal con su vapor. Sin embargo ciertas características coinciden, principalmente la adsorción y la dependencia lineal del nivel de los contaminantes respecto a la humedad.

Sin duda un experimento controlado puede dar mucho más información. Entender el comportamiento presente en el intervalo de temperaturas significaría un avance en la comprensión de la interacción gas-líquido y por tanto en la relación entre contaminantes y humedad.

Considerando que el trabajo fue realizado para contribuir en la planeación y construcción de ciclovías, se listan las siguientes recomendaciones: en las calles de alto tránsito las personas se exponen significativamente más que en calles paralelas, es suficiente alejarnos una calle de distancia y las fronteras absorbentes (parques por ejemplo) disminuyen significativamente

los niveles de contaminantes a sus alrededores. Del modelo de Langmuir se concluye que la humedad disminuye en gran medida los contaminantes que más dañan la salud, de esta forma se puede pensar más en proyectos que mejoren éste aspecto en la ciudad, por ejemplo: construcción y cuidado de áreas verdes en la zona urbana, reforestación y vigilancia en zonas rurales y en general, mayor atención a la situación de medio ambiente en la ciudad.

## Lista de Figuras

1.1	Parque vehicular del año 2000 a 2018 correspondientes: a) a CDMX y b) al conteo nacional. Creación a partir de datos del INEGI . . . . .	2
1.2	a) Pendiente del terreno en la CDMX, b) densidad de población por área geoestadística básica (AGEB), c) densidad de empleos por AGEB y d) división por distritos de tránsito de la Ciudad de México. (Fuente: PB CDMX). . . . .	4
1.3	Distribución de accidentes con ciclistas en el polígono central de CDMX durante el 2017. . . . .	6
3.1	Esquema del dominio $Q_T$ . . . . .	18
3.2	Evolución de $u$ como solución a la ecuación homogénea ( $f = 0$ ) en $R$ y condición inicial $g(x) = \delta(x)$ . . . . .	22
3.3	Simulación de movimiento browniano en 2 dimensiones. . . . .	24
4.1	Esquema de un espacio $\Omega$ 2D . . . . .	31
4.2	Aproximación de $u'$ en el nodo $x_n$ . . . . .	34
4.3	Stencil de la ecuación de difusión en 2D . . . . .	36
5.1	Descripción del espacio topológico $\Omega$ con las respectivas fronteras Neumann y su representación discreta con los respectivos nodos $\Omega_{i,j}$ con dimensiones $X$ y $Y$	39
5.2	Stencil de frontera Neumann, cuando $\bar{n} = (-1, 0)$ . El nodo imaginario esta señalado por el nodo en blanco. . . . .	40
5.3	Stencil para condiciones periódicas $u(x_0, y) = u(x_0 + L, y)$ . A la derecha se muestra la sustitución de los nodos imaginarios. . . . .	41
5.4	Representación de la función $q_{k,n}(x)$ . . . . .	42
5.5	Diagrama de implementación del algoritmo . . . . .	43
5.6	Pseudocódigo del algoritmo que calcula la evolución de $u^n$ a $u^{n+1}$ . . . . .	44
6.1	Evolución del estado inicial aleatorio (a) $t=0.15$ , (b) $t=1.25$ y (c) $t=12.5$ . . . . .	45
6.2	(a) Distribución de contaminantes sobre el eje $y$ (que es el eje perpendicular al flujo) para $t = 200, 1000, 4000$ , (b) gráfica de valor promedio de $u$ a través del tiempo y (c) visualización de $u(x, y)$ para $t = 4000$ en el respectivo espacio $\Omega$ con obstáculos reflejantes y absorbentes aleatorios. . . . .	47
6.3	Distribución de contaminantes respecto al flujo de autos. Se muestran los niveles en la dirección perpendicular al flujo (de acuerdo a la línea azul y roja de la última figura) y el valor máximo en función del flujo. . . . .	50

*Lista de Figuras*

6.4	Distribución de contaminantes paralelos al flujo de fuentes. . . . .	50
6.5	Distribución de contaminantes en dirección perpendicular al flujo respecto al número de carriles (ancho de la calle) . . . . .	51
6.6	Visualización de datos para $PM_{CO}$ en la estación Ajusco Medio . . . . .	52
6.7	Gráfica de $\eta / \sum(\eta)$ en función de $C_{H_2O}$ de los distintos contaminantes. En la parte derecha se muestra la gráfica de $PM_{CO}$ para las estaciones que registraban éste contaminante. . . . .	53
6.8	(a) Ajuste de la fracción de ocupación $f(T)$ ec. (6.2) de $PM_{10}$ en AJM de acuerdo a la ec. (6.1). Visualización de $f(T)$ de $PM_{10}$ en 6 estaciones. (c) Visualización de la $f(T)$ de todos los contaminantes en AJM . . . . .	56

## Bibliografía

- [1] Instituto Nacional de Estadística y Geografía (INEGI). <https://www.inegi.org.mx/datos/>. Consultado: 15-09-2019.
- [2] ONU-Habitat, *Superficie de CDMX crece a ritmo de tres veces superior al de su población*. <https://www.onuhabitat.org.mx/index.php/superficie-de-cdmx-crece-a-ritmo-tres-veces-superior-al-de-su-poblacion>. Consultado: 16-09-2019.
- [3] TomTom Traffic Index. [https://www.tomtom.com/en\\_gb/traffic-index/](https://www.tomtom.com/en_gb/traffic-index/). Consultado: 22-09-2019. Fuente principal TomTom International BV.
- [4] *Estas son las horas de mayor tráfico en la CDMX y la velocidad promedio*. Lider Empresarial. Consultado: 15-09-2019. URL: <https://www.liderempresarial.com/estas-son-las-horas-de-mayor-traffic-en-la-cdmx-y-la-velocidad-promedio/>.
- [5] *CDMX es la cuarta ciudad más lenta del mundo y la primera a nivel nacional*. El Universal. Consultado: 15-09-2019. URL: <https://www.eluniversal.com.mx/autopistas/cdmx-es-la-cuarta-ciudad-mas-lenta-del-mundo-y-la-primera-nivel-nacional>.
- [6] *Plan Bici CDMX*. Instituto de Geografía UNAM, 2018. URL: <http://planbici.cdmx.gob.mx/>.
- [7] M. Sharan, A. K. Yadav, M. Singh, P. Agarwal, and S. Nigam. "A mathematical model for the dispersion of air pollutants in low wind conditions". In: *Science Direct, Elsevier* 30.8 (1996), pp. 1209–1220. DOI: 10.1016/1352-2310(95)00442-4. eprint: [https://doi.org/10.1016/1352-2310\(95\)00442-4](https://doi.org/10.1016/1352-2310(95)00442-4).
- [8] G. Hutomo, J. Kusuma, A. Ribal, A. Mahie, and N. Aris. "Numerical solution of 2-d advection-diffusion equation with variable coefficient using du-fort frankel method". In: *Journal of Physics: Conference Series* 1180 (Feb. 2019), p. 012009. DOI: 10.1088/1742-6596/1180/1/012009.
- [9] H. Youn, M. T. Gastner, and H. Jeong. "Price of Anarchy in Transportation Networks: Efficiency and Optimality Control". In: *Phys. Rev. Lett.* 101 (12 2008), p. 128701. DOI: 10.1103/PhysRevLett.101.128701. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.128701>.
- [10] F. Olsthoorn. *The Price of Anarchy: Measuring the inefficiency of selfish networking (Master's thesis)*. Mathematisch Instituut, Universiteit Leiden, 2012.
- [11] D. Tong. *Lectures on Statistical Physics (Cambridge)*. <http://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/statphys.html>. Consultado: 23-11-2019.

## Bibliografía

- [12] R. K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Butterworth Heinemann, 1996.
- [13] *Statistical Interpretation of Entropy and the Second Law of Thermodynamics: The Underlying Explanation*. <https://courses.lumenlearning.com/physics/chapter/15-7-statistical-interpretation-of-entropy-and-the-second-law-of-thermodynamics-the-underlying-explanation/>. Consultado: 27-02-2019.
- [14] I. Langmuir. "The Adsorption of gases on plane surfaces of glass, mica and platinum". In: *Journal of the American Chemical Society* 40.9 (1918), pp. 1361–1403. DOI: 10.1021/ja02242a004. eprint: <https://doi.org/10.1021/ja02242a004>.
- [15] C. Kittel and H. Kroemer. *Thermal Physics*. 2nd. W. H. Freeman and company, NY, 1980.
- [16] *Langmuir adsorption model*. [https://en.wikipedia.org/wiki/Langmuir\\_adsorption\\_model](https://en.wikipedia.org/wiki/Langmuir_adsorption_model).
- [17] J. H. Seinfeld and S. N. Pandis. *Atmospheric Chemistry and Physics: From air pollution to climate change*. 2nd edition. JOHN WILEY SONS, INC., 2006.
- [18] *Saturated Vapor Pressure, Density for Water*. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Kinetic/watvap.html>. Consultado: 25-11-2019.
- [19] *Equilibrium moisture content*. [https://en.wikipedia.org/wiki/Equilibrium\\_moisture\\_content](https://en.wikipedia.org/wiki/Equilibrium_moisture_content). Consultado: 28-11-2019.
- [20] S. Salsa, F. M. G. Vegni, A. Zaretti, and P. Zunino. *A primer on PDE's: Models, Methods, Simulations*. Springer, 2013.
- [21] W. A. Strauss. *Partial Differential Equations: An introduction*. John Wiley Sons, 2008.
- [22] D. E. Pérez. *Distribution Theory and Fundamental Solution of Differential Operators (Final Degree Dissertation)*. Universidad del País Vasco FCT. 2015. URL: [http://www.bcamath.org/documentos\\_public/archivos/personal/tesis/GAL\\_Daniel\\_Eceizabarrena\\_-\\_Distribution\\_Theory\\_and\\_Fundamental\\_Solutions\\_of\\_Differential\\_Operators.pdf](http://www.bcamath.org/documentos_public/archivos/personal/tesis/GAL_Daniel_Eceizabarrena_-_Distribution_Theory_and_Fundamental_Solutions_of_Differential_Operators.pdf). Consultado: 02-11-2019.
- [23] J. Nash. "Continuity of Solutions of Parabolic and Elliptic Equations". In: *American Journal of Mathematics* 80.4 (1958), pp. 931–954. ISSN: 00029327, 10806377. URL: <http://www.jstor.org/stable/2372841>.
- [24] C. D. Lellis. *The masterpieces of John Forbes Nash Jr.* 2016. arXiv: 1606.02551 [math.AP].
- [25] R. B. F. H. M. R. A. V.P.L.S. "A brief account of microscopical observations made in the months of June, July and August 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies". In: *The Philosophical Magazine* 4.21 (1828), pp. 161–173. DOI: 10.1080/14786442808674769.
- [26] J. Perrin. "Mouvement brownien et molécules". In: *J. Phys. Theor. Appl* 9.1 (1997), pp. 5–39. DOI: 10.1051/jphysap:0191000900500.

## Bibliografía

- [27] A. Einstein. "Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen". In: *Annalen der Physik* 322.8 (1905), pp. 549–560. doi: 10.1002/andp.19053220806.
- [28] D. S. Lemons and A. Gythiel. "Paul Langevin's 1908 paper "On the Theory of Brownian Motion" ["Sur la théorie du mouvement brownien," C. R. Acad. Sci. (Paris) 146, 530–533 (1908)]". In: *American Journal of Physics* 65.11 (1997), pp. 1079–1081. doi: 10.1119/1.18725.
- [29] A. Satoh. *Introduction to practice of molecular simulation : molecular dynamics, Monte Carlo, Brownian dynamics, Lattice Boltzmann, dissipative particle dynamics*. Elsevier, 2011.
- [30] E. Britannica, ed. *Stokes's law*. <https://www.britannica.com/science/Stokess-law>. Consultado: 16-03-2020.
- [31] W. Coffey, Y. P. Kalmykov, and J. T. Waldron. *The Langevin Equation: With Applications in Physics, Chemistry and Electrical Engineering*. World Scientific Publishing, 1996.
- [32] D. F. Giffiths, J. W. Dold, and D. J. Silvester. *Essential Partial Differential Equations: Analytical and computational aspects*. Springer, 2015.
- [33] E. Süli and D. F. Mayers. *An Introduction to Numerical Analysis*. Cambridge University Press, 2003.
- [34] H. P. Langtangen and S. Linge. *Finite Difference Computing with PDEs: A Modern Software Approach*. Springer, 2017.
- [35] J. Bezanson, A. Edelman, S. Karpinski, and V. B. Shah. "Julia: A fresh approach to numerical computing". In: *SIAM review* 59.1 (2017), pp. 65–98. URL: <https://doi.org/10.1137/141000671>.
- [36] *Contaminantes (Datos aire-CDMX)*. <http://www.aire.cdmx.gob.mx/default.php?opc=%27aKBhnmI=%27&opcion=Zg==>. Consultado: 15-11-2019.