

METODOS DE ESTIMACION Y CONTROL DE CONTAMINANTES

Yuri N. Skiba y David Parra-Guevara

Centro de Ciencias de la Atmósfera, UNAM, D.F., México
skiba@servidor.unam.mx, pdavid@atmosfera.unam.mx

El aumento de las emisiones industriales, debido al desarrollo intensivo de los medios de producción, contaminan el medio ambiente y quebrantan el equilibrio ecológico en muchas regiones de nuestro planeta. Dado que muchas sustancias de alguna manera influyen en la contaminación ambiental, el problema inmediato que surge consiste en reducir su impacto negativo. En los últimos años, el tema de la protección y recuperación del medio ambiente se ha convertido en una de las tareas más importantes de la ciencia.

1. Problema de transporte y difusión

Con el fin de simplificar el estudio, consideraremos el problema de transporte de contaminantes aparte del problema completo de la dinámica de la atmósfera y nos limitamos al caso de dos dimensiones.

Condiciones iniciales y de frontera. Sea D un dominio bidimensional limitado que contiene N industrias ubicadas en puntos $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$, $i = 1, 2, \dots, N$. Denotemos por $\phi(\mathbf{r}, t)$ la concentración de un contaminante en punto $\mathbf{r} = (x, y)$ y momento $t > 0$. Para estudiar la propagación del contaminante, consideramos en $D \times (0, T)$ la ecuación de transporte bidimensional (integrado verticalmente)

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

con

$$f(\mathbf{r}, t) \equiv \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (1.2)$$

donde $Q_i(t)$ es la tasa de emisión de la industria i -ésima, $\mu(\mathbf{r}, t) > 0$ es el coeficiente de difusión, ∇ es el gradiente bidimensional, y $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ es la función de Dirac en el punto \mathbf{r}_i . El parámetro $\sigma(\mathbf{r}, t) > 0$ caracteriza la velocidad del decaimiento exponencial de la concentración $\phi(\mathbf{r}, t)$ por varios procesos físicos y químicos. Se asume que la velocidad del viento $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = \{u(\mathbf{r}, t), v(\mathbf{r}, t)\}$ es dada (vientos climáticos, o vientos determinados mediante un modelo dinámico) y satisface la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (1.3)$$

En el momento inicial $t = 0$ la solución es dada:

$$\phi(\mathbf{r}, 0) = \phi^0(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

Para obtener un problema bien planteado, hay que tener cuidado en el uso de condiciones en la frontera S del dominio D (Marchuk y Skiba, 1976; Marchuk, 1986). Sea $U_n = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n}$ la proyección de la velocidad \mathbf{U} en la normal unitaria externa \mathbf{n} a la frontera S . Dividimos S en la parte de salida S^+ donde $U_n \geq 0$ (el flujo de contaminación se dirige fuera del D), y la parte de entrada S^- donde $U_n < 0$ (el flujo de contaminación se dirige en D). Tomamos

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} \phi - U_n \phi = 0 \text{ at } S^-, \quad \mu \frac{\partial}{\partial n} \phi = 0 \text{ at } S^+ \quad (1.5)$$

como condiciones de frontera (Skiba, 1997; Skiba y Parra-Guevara, 2011).

Ecuaciones integrales. Al integrar la ecuación (1.1) sobre el dominio D y tomar en cuenta (1.3) y (1.5) se obtiene la ecuación de balance de la masa total del contaminante

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^N Q_i(t) - \int_D \sigma \phi d\mathbf{r} - \int_{S^+} U_n \phi dS \quad (1.6)$$

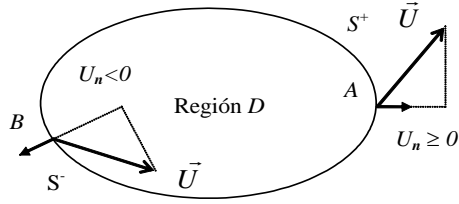


Fig.1. Región esquemática (área limitada) D con la frontera abierta $S = S^+ + S^-$ donde se busca la solución del problema de transporte (1.1)-(1.5).

Al integrar la ecuación (1.1) pre-multiplicada por $\phi(\mathbf{r}, t)$ sobre el dominio D y usar (1.3) y (1.5) se obtiene otra ecuación integral

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_D \phi^2 d\mathbf{r} = 2 \sum_{i=1}^N Q_i(t) \phi(\mathbf{r}_i, t) - 2 \int_D (\sigma \phi^2 + \mu |\nabla \phi|^2) d\mathbf{r} - \int_S |U_n| \phi^2 dS \quad (1.7)$$

De acuerdo con (1.6) y (1.7), tanto la concentración total del contaminante en el dominio $\int_D \phi d\mathbf{r}$, como la norma de solución $\|\phi\| = \left(\int_D \phi^2 d\mathbf{r}\right)^{1/2}$ crecen debido a las tasas de emisión no nulas $Q_i(t)$ y, al mismo tiempo, decrecen debido a los procesos de disipación ($\sigma > 0$, $\mu > 0$) y el flujo advectivo de la contaminación a través de la frontera del dominio D .

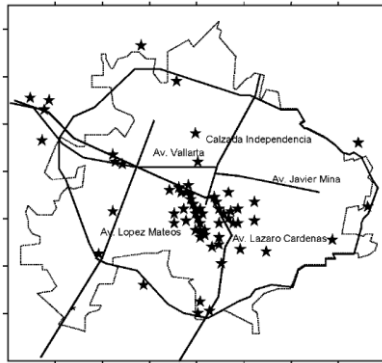


Fig.2. Avenidas principales de la ciudad de Guadalajara y ubicaciones de 52 utilidades principales que queman combustibles fósiles y emiten el dióxido de azufre (Skiba y Davydova-Belitskaya, 2003).

Fuentes de contaminación. La función $f(\mathbf{r}, t)$ depende del tipo de la fuente de contaminación. Por ejemplo, cuando hay N empresas industriales en D (Fig.2) tomamos

$$f(\mathbf{r}, t) \equiv \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (1.8)$$

donde $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ y $Q_i(t)$ son la ubicación y tasa de emisión de la empresa i -ésima, respectivamente ($i=1, 2, \dots, N$). Y si en lugar de las fuentes puntuales se consideran N fuentes distribuidas linealmente, como las emisiones de los vehículos a lo largo de las carreteras R_i (Fig.3), entonces

$$f(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} Q_i(\mathbf{r}, t), & \text{si } \mathbf{r} \in R_i \\ 0, & \text{si } \mathbf{r} \notin R_i \end{cases} \quad (i=1, 2, \dots, N) \quad (1.9)$$

donde $Q_i(\mathbf{r}, t)$ es una función continua que describe la tasa de emisión de un contaminante a lo largo de avenida R_i ($i=1, 2, \dots, N$). Sin embargo, las tasas de emisión superficialmente distribuidas o distribuidas a lo largo de carreteras también se pueden describir en la forma discreta (1.8) (Skiba y Davydova-Belitskaya, 2003; Parra-Guevara and Skiba, 2003).

La figura 3 muestra la importancia de vientos en la distribución de las concentraciones de monóxido de carbono calculadas con el modelo (1.1)-(1.5) en la ciudad de Guadalajara: vientos climáticos de la temporada de lluvias (a) y de la estación seca (b). Las fuentes vehiculares fueron discretizadas en la forma (1.11) a lo largo de las avenidas principales de la ciudad (Skiba y Davydova-Belitskaya, 2003).

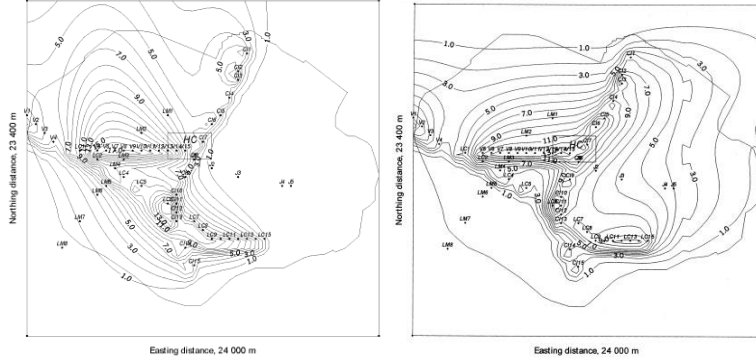


Fig.3. Isolneas de la concentración de CO calculada en momento $t = 180 \text{ min}$ con el modelo (1.1)-(1.5) usando el viento climático de la temporada de lluvias (a), y de la estación seca (b). Las concentraciones se dan en gm^{-2} .

2. Modelo adjunto de transporte de contaminantes

El modelo adjunto en la región D (Fig.1) e intervalo de tiempo $(0, T)$ se establece usando el operador adjunto del modelo (1.1)-(1.5) y la identidad de Lagrange (Marchuk y Skiba, 1976; Marchuk, 1986):

$$-\frac{\partial g}{\partial t} - \mathbf{U} \cdot \nabla g + \sigma g - \nabla \cdot (\mu \nabla g) = p(\mathbf{r}, t) \quad \text{en } D \times (0, T) \quad (2.1)$$

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

$$\mu \frac{\partial g}{\partial n} = 0 \quad \text{en } S^-, \quad \mu \frac{\partial g}{\partial n} + U_n g = 0 \quad \text{en } S^+ \quad (2.3)$$

Comparamos ahora el problema original (1.1)-(1.5) con el problema adjunto (2.1)-(2.3) en el caso cuando $f(\mathbf{r}, t) \equiv 0$ y $p(\mathbf{r}, t) \equiv 0$. Notemos que después de la sustitución $t' = T - t$ en (2.1), el problema adjunto se diferencia del problema original (1.1)-(1.5) sólo en el signo de la velocidad \mathbf{U} . Así, la parte de salida S^+ (o la parte de entrada S^-) para la ecuación (1.1) es, en el mismo tiempo, la parte de entrada S^- (la parte de salida S^+) para la ecuación (2.1). Se deduce de aquí que el problema adjunto está bien planteado sólo si se resuelve en la dirección de tiempo opuesta: de $t = T$ a $t = 0$.

3. Principio de dualidad y particularidades de las estimaciones duales

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

$$\int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \omega(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt = 1, \quad (3.1)$$

entonces la integral

$$J_{\omega}(\phi) = \int_{T-\tau}^T \int_{\Omega} \omega(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt \quad (3.2)$$

representa la concentración promedio del contaminante $\phi(\mathbf{r}, t)$ en la zona Ω y el intervalo $(T - \tau, T)$.

Vamos a restar la ecuación (2.1) pre-multiplicada por $\phi(\mathbf{r}, t)$ de la ecuación (1.1) pre-multiplicada por $g(\mathbf{r}, t)$, y luego integramos el resultado obtenido sobre el dominio $D \times (0, T)$. Teniendo en cuenta la forma del forzamiento (1.2), las condiciones de frontera (1.5) y (2.3), y la condición inicial nula (2.2), se obtiene

$$\int_0^T \int_D p(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\mathbf{r}_i, t) Q_i(t) dt + \int_D g(\mathbf{r}, 0) \phi^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3.3)$$

Si el forzamiento del problema adjunto $p(\mathbf{r}, t)$ se define como

$$p(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} \omega(\mathbf{r}, t), & \text{si } (\mathbf{r}, t) \in \Omega \times (T - \tau, T) \\ 0, & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (3.4)$$

entonces la fórmula (3.3) conduce a una estimación de la concentración promedio del contaminante $\phi(\mathbf{r}, t)$ en zona Ω e intervalo de tiempo $(T - \tau, T)$:

$$J_\omega(\phi) \equiv \int_{T-\tau}^T \int_\Omega \omega(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\mathbf{r}_i, t) Q_i(t) dt + \int_D g(\mathbf{r}, 0) \phi^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3.5)$$

En el caso particular cuando $\omega(\mathbf{r}, t) = 1/(\tau|\Omega|)$, donde $|\Omega|$ es el área de Ω , las fórmulas (3.2) y (3.5) proporcionan las estimaciones equivalentes, o duales (Marchuk y Skiba, 1976): la estimación directa

$$J(\phi) \equiv \frac{1}{\tau|\Omega|} \int_{T-\tau}^T \int_\Omega \phi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} dt, \quad (3.6)$$

y la estimación adjunta

$$J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\mathbf{r}_i, t) Q_i(t) dt + \int_D g(\mathbf{r}, 0) \phi^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3.7)$$

que muestra la dependencia explícita de la concentración promedio del contaminante $J(\phi)$ en la zona Ω , de las tasas de emisión $Q_i(t)$ y la distribución inicial $\phi^0(\mathbf{r})$ del contaminante en D . Además, la solución $g(\mathbf{r}, t)$ no depende de estos parámetros y, por lo tanto, sólo es la función de peso que pondera a $\phi^0(\mathbf{r})$ y a las tasas de emisión $Q_i(t)$, $i = 1, \dots, N$. Notemos que la estimación (3.7) sólo usa los valores de la solución adjunta en los nodos \mathbf{r}_i de las fuentes ($g(\mathbf{r}_i, t)$) y en el momento $t = 0$ ($g(\mathbf{r}, 0)$). También notemos que el papel de la distribución inicial $\phi^0(\mathbf{r})$ decrece cuando intervalo $(0, T - \tau)$ aumenta (Skiba, 1993). En efecto, según (3.4), el forzamiento $p(\mathbf{r}, t) \equiv 0$ en el intervalo $(0, T - \tau)$ y, debido a disipación de modelo ($\sigma > 0$), la función de peso $g(\mathbf{r}, 0)$ que aparece en (3.7) decrece cuando $T - \tau$ aumenta.

El hecho de que el problema adjunto (2.1)-(2.3) puede resolverse para cada zona de importancia ecológica Ω (Fig.4), independientemente del número de plantas industriales N , las tasas de emisión $Q_i(t)$ y sus posiciones \mathbf{r}_i , hace las estimaciones adjuntas muy convenientes y eficientes en el estudio de sensibilidad de la solución, por ejemplo, cuando se analizan la N -dependencia, la \mathbf{r}_i -dependencia y/o la $Q_i(t)$ -dependencia de la concentración $J(\phi)$ en la zona.

Mientras las estimaciones directas requieren la solución del problema de transporte de la contaminación (1.1)-(1.5) y permiten realizar un análisis exhaustivo de la situación ecológica en toda la zona, las estimaciones adjuntas usan sólo soluciones al problema adjunto y son eficaces y económicos en el estudio de sensibilidad de problema (Marchuk y Skiba, 1976). A veces la estimación (3.7) proporciona una respuesta inmediata a un problema no trivial. En particular, es fundamental para resolver el problema de control de emisiones industriales.

4. Sensibilidad de las estimaciones

Derivamos algunas fórmulas de sensibilidad. Como el problema (1.1)-(1.5) es lineal, es fácil conseguir que

$$\delta J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\mathbf{r}_i, t) \delta Q_i(t) dt + \int_D g(\mathbf{r}, 0) \delta \phi^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (4.1)$$

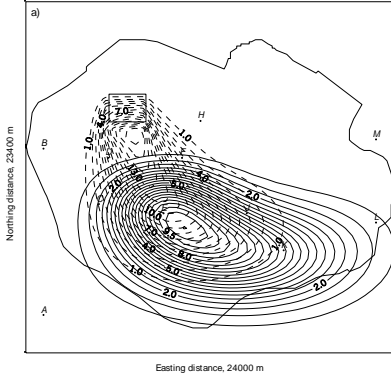


Fig. 4. Isolíneas de la solución del problema adjunto $g(\mathbf{r}, t)$ calculada para el parque Colomos en la ciudad de Guadalajara en $t = T - 60 \text{ min}$ (líneas de puntos) y $t = T - 90 \text{ min}$ (líneas continuas); $T = 360 \text{ min}$.

donde $\delta J(\phi)$ es una variación de la concentración de contaminación (3.7) en zona Ω debido a variaciones en la contaminación inicial $\phi^0(\mathbf{r})$, en las tasas de emisión $\delta Q_i(t)$, o en el número de plantas industriales N .

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

$$\delta J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T [g(\mathbf{r}'_i, t) - g(\mathbf{r}_i, t)] Q_i(t) dt \quad (4.2)$$

Tenga en cuenta que en (4.1) y (4.2) todas las variaciones son arbitrarias. Por último, vamos a derivar una fórmula útil de tipo general que permite analizar la sensibilidad de la concentración $J(\phi)$ con respecto a pequeñas variaciones (errores) en los parámetros del modelo. Sea ϕ una solución del problema (1.1)-(1.5), y sea $\phi + \phi'$ una solución del problema perturbado

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\phi + \phi') + (\mathbf{U} + \mathbf{U}') \cdot \nabla (\phi + \phi') + (\sigma + \sigma') (\phi + \phi') \\ - \nabla \cdot [(\mu + \mu') \nabla (\phi + \phi')] = f + f' \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\phi(\mathbf{r}, 0) + \phi'(\mathbf{r}, 0) = \phi^0(\mathbf{r}) + \delta \phi^0(\mathbf{r}) \quad \text{en } D \quad (4.4)$$

$$\mu \frac{\partial}{\partial n} (\phi + \phi') - U_n (\phi + \phi') = 0 \quad \text{en } S^-, \quad \mu \frac{\partial}{\partial n} (\phi + \phi') = 0 \quad \text{en } S^+ \quad (4.5)$$

donde

$$f(\mathbf{r}, t) + f'(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N [Q_i(t) + \delta Q_i(t)] \delta(\mathbf{r} - [\mathbf{r}_i + \delta \mathbf{r}_i]) \quad (4.6)$$

Supongamos que en el problema (4.3)-(4.6), \mathbf{U}' y μ reducen a cero en la frontera S . Si las perturbaciones \mathbf{U}' , ϕ' , μ' , σ' , $\delta \phi^0$, $\delta \mathbf{r}_i$ son pequeñas, y el método adjunto se aplica a la ecuación de perturbación linealizada

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi' + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi' + \sigma \phi' - \nabla \cdot [\mu \nabla \phi'] = f - \mathbf{U}' \cdot \nabla \phi - \sigma' \phi + \nabla \cdot [\mu' \nabla \phi]$$

entonces obtenemos

$$\begin{aligned} \delta J(\phi) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\mathbf{r}_i, t) \delta Q_i(t) dt + \int_D g(\mathbf{r}, 0) \delta \phi^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ + \sum_{i=1}^N \int_0^T [\nabla g(\mathbf{r}_i, t) \cdot \delta \mathbf{r}_i] Q_i(t) dt - \int_0^T \int_D g \{ \mathbf{U}' \cdot \nabla \phi + \sigma' \phi - \nabla \cdot [\mu' \nabla \phi] \} d\mathbf{r} dt \end{aligned} \quad (4.7)$$

Esta fórmula de sensibilidad muestra la contribución de las pequeñas perturbaciones $\delta Q_i(t)$ y $U', \phi', \mu', \sigma', \delta\phi^0, \delta\mathbf{r}_i$ a la variación $\delta J(\phi)$ en la zona Ω . Los dos primeros términos en el lado derecho de (4.7) coinciden con (4.1) y demuestran el papel de variaciones en las tasas de emisión $\delta Q_i(t)$ y la contaminación inicial $\delta\phi^0$, y los términos tercero y cuarto muestran la contribución de las perturbaciones en las condiciones de contorno. El último término representa el efecto de las perturbaciones U', σ' y μ' , y es el único término en (4.7) que utiliza la solución $\phi(\mathbf{r}, t)$ del problema no perturbado en el dominio $D \times (0, T)$. Sin embargo, si $U' = \sigma' = \mu' = 0$ en todas partes del dominio D entonces la solución $\phi(\mathbf{r}, t)$ no se utiliza, y el problema adjunto (2.1)-(2.3) es el único problema a ser resuelto.

5. Problema de control de emisiones

La formulación general del problema de control a corto plazo es la siguiente. Sea M un modelo de dispersión a corto plazo que se utiliza para pronosticar la concentración ϕ de un contaminante en un dominio limitado $D \subset \mathbf{R}^m$ ($m=2,3$) en intervalo de tiempo finito $[0, T]$:

$$M : \vec{Q} \mapsto \phi, \quad \vec{Q} = (Q_1, Q_2, \dots, Q_N)$$

donde Q_i son las tasas de emisión de contaminante no estacionarias y no negativas de las fuentes situadas en puntos $\mathbf{r}_i \in D$. La concentración promedio de contaminante en una zona $\Omega \subset D$ de medida (área o volumen) $|\Omega|$ e intervalo $[T-\tau, T]$ de longitud τ se define por el funcional (3.6). Por lo tanto, si $J(\phi) > J_0$, donde J_0 es la norma sanitaria de la concentración de contaminante en el aire, entonces las tasas de emisión \vec{Q} son excesivas y el problema de control consiste en la determinación de tales nuevas tasas \vec{Q}^* que $J(\phi) \leq J_0$.

En general, este problema inverso es mal planteado, ya que puede haber muchas soluciones o ninguna, dependiendo de la distribución inicial de contaminantes ϕ^0 (Parra-Guevara y Skiba, 2003, 2006). Para plantear bien el problema, hay que aplicar alguno de los métodos de regularización que, en cierto sentido, representa una estrategia de control.

Estrategia de control 1: control en la masa emitida. Se define el funcional $F : L_2(0, T) \rightarrow \mathbf{R}$ como:

$$F(Q) = \|Q\|^2 \quad (5.1)$$

donde $\|Q\| = \sqrt{\int_0^T Q^2(t) dt}$ es la norma inducida en $L_2(0, T)$. El funcional $F(Q)$ mide la masa total del contaminante que es emitida por las fuentes puntuales ubicadas en puntos \mathbf{r}_i con tasas $Q_i(t)$ en el intervalo de tiempo $[0, T]$. La primera estrategia de control se define a través del siguiente problema de optimización:

$$\min F(Q) = \sum_{i=1}^N \|Q_i\|^2, \quad \text{sujeito a } J(\phi) \leq J_0 \quad (5.2)$$

La solución es

$$Q_i^* = \gamma_i \alpha \frac{g(\mathbf{r}_i, t)}{\|g(\mathbf{r}_i)\|^2}, \quad i=1, \dots, N, \quad \alpha = J_0 - \int_D g(\mathbf{r}, 0) \phi^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (5.3)$$

donde $\gamma_1 + \gamma_2 + \dots + \gamma_N = 1$ y $\gamma_i = m_i / (\sum_{j=1}^N m_j)$ representa la fracción, que corresponde a la industria i -ésima ($i=1, \dots, N$), de la masa total del contaminante que puede ser emitido cuando las empresas trabajan sin restringir su capacidad (Parra-Guevara y Skiba, 2000, 2003; Parra-Guevara, 2001).

Estrategia de control 2: control en la estructura temporal de $Q_i(t)$. La estrategia de control (5.3), sin embargo, puede tener la desventaja de forzar el paro de las fuentes

industriales en algún periodo de tiempo, ya que las tasas de emisión se definen proporcionalmente a los valores de función adjunta $g(\mathbf{r}_i, t)$, y ésta puede ser cero en algún intervalo. Ahora se formula una estrategia de control, que a diferencia de (5.3), restringe la estructura de las tasas de emisión en $(0, T)$, y además, no requiere el paro de la actividad industrial cuando la solución adjunta $g(\mathbf{r}_i, t)$ se anula. El objetivo es hallar $Q_i^*(t) \in L_2(0, T)$ tales que $J(\phi) \leq J_0$. La idea es permitir que $Q_i^*(t)$ tome valores grandes cuando $g(\mathbf{r}_i, t)$ tiene valores pequeños, y que $Q_i^*(t)$ tome valores pequeños cuando $g(\mathbf{r}_i, t)$ tiene valores grandes. La ventaja en este criterio es que en un determinado intervalo de tiempo se permitiría la operación al máximo de la fuente ubicada en \mathbf{r}_i (por ejemplo, si $g(\mathbf{r}_i, t) = 0$) (Parra-Guevara y Skiba, 2000, 2003; Parra-Guevara, 2001).

Se definen para cada $i (i = 1, \dots, N)$, las funciones auxiliares G_i como

$$G_i(t) = \left\{ \begin{array}{ll} \alpha (|I_i| \cdot g(\mathbf{r}_i, t))^{-1}, & \text{si } t \in I_i \\ \delta_i, & \text{si } t \in [0, T] \setminus I_i \end{array} \right\}, \quad (5.4)$$

donde $I = \{t \in [0, T] \mid g(\mathbf{r}_0, t) > 0\}$ y $|I|$ denota su longitud, δ_i es la tasa de emisión máxima correspondiente a la industria i -ésima, y $[0, T] \setminus I_i$ es el complemento del conjunto I_i al conjunto $[0, T]$. La solución es

$$Q_i^*(t) \leq \gamma_i \cdot \min\{\delta_i, G_i(t)\} \quad \text{para cada } t \in [0, T] \text{ y } i = 1, \dots, N \quad (5.5)$$

Estrategia de control 3: tasas de emisiones invariantes óptimas. Supongamos que hay N plantas industriales que operan en el dominio D . Sea δ_i la máxima tasa de emisión posible de la planta industrial i -ésima (cuando se funciona a plena capacidad) ubicada en el punto \mathbf{r}_i , $i = 1, \dots, N$. Si $J(\phi) > J_0$ cuando todas las plantas operan a plena potencia, entonces es necesario disminuir las tasas de emisión. Teniendo en cuenta (5.3) se puede decir que buscamos las tasas máximas posibles invariantes $Q_i^* \leq \delta_i$ que minimizan los valores $\delta_i - Q_i$ y satisfacen la condición $\sum_{i=1}^N a_i Q_i = \alpha$, donde $a_i = \int_0^T g(\mathbf{r}_i, t) dt > 0$. Así, esta estrategia se puede formular como el problema de optimización:

$$\min H(Q_1, Q_2, \dots, Q_N) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\gamma_i} (Q_i - \delta_i)^2 \quad \text{tal que} \quad \sum_{i=1}^N a_i Q_i = \alpha \quad (5.6)$$

Usando los multiplicadores de Lagrange se obtiene

$$\lambda = 2 \left(\alpha - \sum_{i=1}^N a_i \delta_i \right) / \left(\sum_{i=1}^N a_i^2 \gamma_i \right), \quad Q_i = \delta_i + 0.5 \lambda a_i \gamma_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (5.7)$$

El multiplicador λ es negativo y, por tanto, $Q_i \leq \delta_i$ para cualquier i . También, $Q_i \approx \delta_i$ para pequeños γ_i , ya que $\delta_i - Q_i = \gamma_i \lambda a_i / 2$. Así, esta estrategia impone más limitaciones en las plantas industriales de gran tamaño.

6. Estrategias de control óptimo a corto plazo

Definimos un funcional

$$F(\bar{q}) = \|\bar{Q} - \bar{q}\|^2 = \sum_{i=1}^N \|Q_i - q_i\|_{L_2(0, T)}^2 = \sum_{i=1}^N \int_0^T (Q_i - q_i)^2 dt \quad (6.1)$$

en el conjunto

$$\Theta = \left\{ q_i(t) \in L_2[0, T]; \quad q_i(t) \geq 0, \quad (i = 1, \dots, N) \mid J(\phi_{\bar{q}}) \leq J_0 \right\} \quad (6.2)$$

donde las componentes $q_i(t)$ del vector $\vec{q}(t) = \{q_1(t), q_2(t), \dots, q_N(t)\}$ representan nuevas tasas de emisiones (de las mismas fuentes), que ya garantizan el cumplimiento de la norma sanitaria en la zona Ω : $J(\phi) \leq J_0$. El problema de control óptimo (Parra-Guevara y Skiba, 2006, 2007) consiste en la determinación de tales $\vec{Q}^*(t) \in \Theta$ que

$$F(\vec{Q}^*) = \inf_{\vec{q} \in \Theta} H(\vec{q}). \quad (6.3)$$

Teorema 1. Sea $\alpha > 0$. Entonces el problema de control óptimo (6.3) tiene una solución.

La siguiente afirmación da una forma explícita de la solución al problema de control (6.3) en el caso más sencillo, cuando hay sólo una fuente de contaminación en D .

Teorema 2. Sea $Q(t)$ una tasa de emisión de la única fuente puntual ubicada en el sitio \mathbf{r}_0 , y $J(\phi) > J_0$. Entonces

$$Q^*(t) = Q(t) - \beta g(\mathbf{r}_0, t), \quad \beta = (J(\phi_0) - J_0) / \int_0^T g^2(\mathbf{r}_0, t) dt, \quad (6.4)$$

es la solución óptima del problema de control (4.6.3), siempre que se trata de una función no negativa en $[0, T]$.

Lema 1. Sea $\vec{Q}^* \in \Theta$ la solución del problema de control óptimo (6.3). Entonces

$$Q_i^*(t) \leq Q_i(t), \quad 0 \leq t \leq T, \quad 1 \leq i \leq N. \quad (6.5)$$

Teorema 3. Sea \vec{Q}^* la solución del problema de control óptimo (6.3). Entonces

$$(\vec{g}, \vec{Q}^*) = \sum_{i=1}^N \int_0^T g(\mathbf{r}_i, t) Q_i^*(t) dt = \alpha \quad (6.6)$$

Control por combinaciones lineales convexas. Se puede mezclar diferentes estrategias de control por medio de combinaciones lineales convexas. Sean $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_M$ constantes no negativas tales que $\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_M = 1$, donde M es el número de estrategias de control previamente definidas, además cada una de las estrategias garantiza el cumplimiento de la norma sanitaria en la zona: $J(\phi) \leq J_0$. Sea $Q_{i,k}^*$ la tasa de emisión correspondiente a la i -ésima fuente contaminante, que es definida por la k -ésima estrategia de control; se consideran las nuevas tasas de emisión como

$$q_i^*(t) = \sum_{k=1}^M \xi_k Q_{i,k}^*(t), \quad i = 1, \dots, N \quad (6.7)$$

también satisfacen la norma de calidad del aire: $J(\phi) \leq J_0$.

Ejemplo. Sea $D = (0, 2 \text{ km}) \times (0, 2 \text{ km})$ un dominio cuadrado, en el cual se encuentra una fuente puntual única (Parra-Guevara y Skiba, 2006). La fuente se ubica en el punto $\mathbf{r}_1 = (1.8, 0.2)$ y emite partículas de plomo, con la tasa de emisión no estacionaria. Supongamos $\phi^0(\mathbf{r}) = 0$ en D , $\sigma = 0.001 \text{ h}^{-1}$ y $\mu = 0.04 \text{ km}^2 \text{ h}^{-1}$. La velocidad del viento $U = (u, v)$ se define por la función de corriente $\psi = xy$:

$$u = -\psi_y = -x \quad y \quad v = \psi_x = y, \quad (6.8)$$

El modelo de dispersión y su adjunto se consideran en el intervalo $(0, T)$ de cuatro horas. Vamos a monitorear la concentración medio $J(\phi)$ del plomo en la zona $\Omega = [0, 0.5] \times [0.5, 1.0]$ durante el mismo período de tiempo ($\tau = T = 4 \text{ h}$). La norma sanitaria J_0 es $1.5 \mu\text{g m}^{-3}$.

Los cuatro tipos diferentes de las tasas de emisión Q han sido considerados en las unidades kg / h (Fig.5):

$$Q_1(t) = 3.8, \quad Q_2(t) = \begin{cases} 4, & 0 \leq t < 1 \\ 5-t, & 1 \leq t \leq 4 \end{cases}, \quad Q_3(t) = \cos \pi t + 3.5, \quad Q_4(t) = \begin{cases} 3, & 0 \leq t < 1 \\ \frac{2}{3}(t-1) + 3, & 1 \leq t \leq 4 \end{cases}.$$

Así, Q_1 es constante, Q_2 es invariable durante la primera hora y luego decrece linealmente, Q_3 es una función periódica con el periodo de dos horas, y Q_4 es invariable durante la primera hora y luego crece linealmente. Las concentraciones medias de plomo $J(\phi)$ calculadas en la zona Ω con cada una de las cuatro tasas de emisiones son $2.11 \mu\text{g m}^{-3}$, $2.02 \mu\text{g m}^{-3}$, $1.97 \mu\text{g m}^{-3}$ y $1.81 \mu\text{g m}^{-3}$, respectivamente.

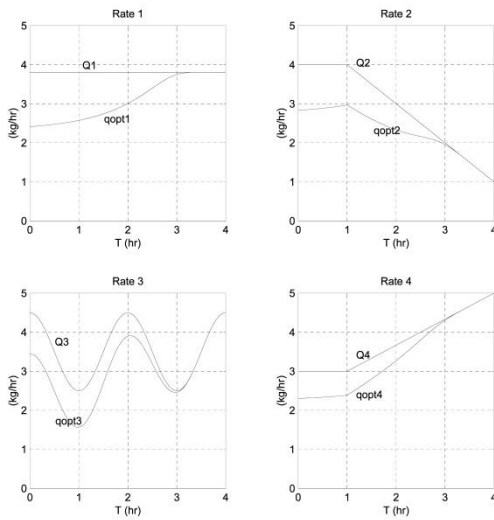


Fig.5. Comportamiento temporal de las tasas de emisión originales $Q_i(t)$ y tasas de emisión óptimas $q_{opt i}(t)$ en los cuatro experimentos.

Dado que todos los resultados no son satisfactorios (ya que superan la norma sanitaria J_0), aplicaremos ahora el método de control óptimo (6.4). Las tasas de emisión óptimas $q_{opt i}$ dadas por el control se muestran en la figura 5. Las concentraciones de contaminación medias $J(\phi)$ obtenidas con las tasas de emisión óptimas coinciden con la norma sanitaria J_0 , como debe ser. En total acuerdo con la teoría $q_{opt i}(t) \leq Q_i(t)$ para cada $t \in (0,4)$ y $1 \leq i \leq 4$, también se observa que $q_{opt i}(t) = Q_i(t)$ durante la última hora ($3 \leq t \leq 4$), es decir, las tasas de emisión, óptima y original, coinciden el uno al otro durante el período en que la solución del modelo adjunto $g(\mathbf{r}_i, t)$ es igual a cero, y las emisiones no dan ninguna contribución a la zona Ω .

Por último, es interesante notar que en el intervalo en el que estos valores no coinciden ($0 \leq t < 3$), el comportamiento temporal de cada una tasa de emisión óptima $q_{opt i}(t)$ es similar al de la tasa original correspondiente Q_i . Este hecho es algo útil para la industria, ya que no debe cambiar drásticamente su rutina de trabajo.

7. Aplicaciones del método adjunto

Aplicamos el método adjunto para evaluar el impacto de un derrame de petróleo (Skiba, 1996, 1999) o emisiones vehiculares (Skiba y Davydova-Belitskaya, 2003), para detectar las empresas industriales que violan las tasas de emisión prescritas por un control (Skiba, 2003). Dicho método puede ser utilizado para detectar y multar a los infractores. También fue desarrollado un método numérico que permite elegir, para una nueva empresa industrial, la ubicación en el sentido de que la operación de la nueva empresa no va a violar las normas sanitarias establecidas en zonas ecológicamente importantes (Skiba y otros, 2005). El método se ilustra con un ejemplo sencillo en el que se tienen en cuenta sólo dos tipos de vientos climáticos, once empresas industriales y tres zonas de importancia ecológica (Fig.5).

8. Método variacional para la remediación de sistemas acuáticos contaminados con biofilms

Supongamos que hay que purificar N zonas contaminadas Ω_i en un sistema acuático mediante el uso de un agente químico (el limpiador), $i = 1, \dots, N$ (Parra-Guevara y Skiba,

2007). El limpiador lanzado en un punto $\mathbf{r}_0 \in D$, luego se propaga por la difusión y corrientes y, al llegar a las zonas Ω_i , purifica aguas contaminadas. El objetivo es encontrar el punto de descarga adecuado \mathbf{r}_0 y la velocidad de descarga Q del limpiador, de tal manera que esto generará las concentraciones necesarias (críticas) \bar{J}_i del limpiador en zonas Ω_i durante ciertos intervalos de tiempo.

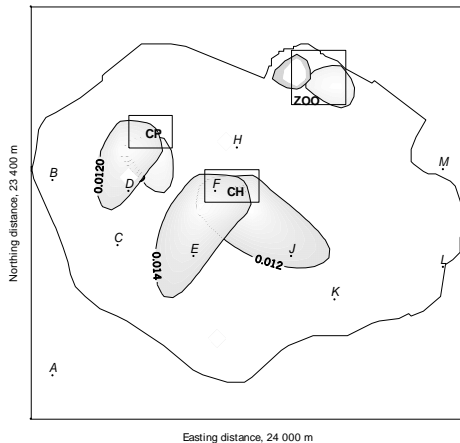


Fig.5. El dominio no sombreado es la intersección de seis subdominios definidos con las desigualdades

$$\int_0^T g_k(\mathbf{r}_0, t) dt \leq \bar{J}_k / Q_0, \quad (k = 1, \dots, K)$$

para las tres zonas y los dos vientos climáticos. Para simplificar, sólo 11 plantas industriales se han tenido en cuenta. El área no sombreada decrece al tomar en cuenta más zonas, más tipos de vientos y más plantas industriales (Skiba y otros, 2005).

A veces, cuando el contaminante es resistente (biofilms), con el fin de limpiar bien la zona, se requiere mantener la concentración crítica \bar{J}_i de un agente antimicrobiano (cloro, yodo, etcétera) en cada zona Ω_i durante un intervalo de tiempo grande $(T - \tau, T)$ de longitud τ . Por lo tanto, tenemos que determinar el punto de descarga \mathbf{r}_0 y la tasa de descarga Q con el fin de cumplir con las constricciones siguientes:

$$J_i(\phi) = \bar{J}_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (8.1)$$

donde $\phi(\mathbf{r}, t)$ es la concentración del limpiador dada por el modelo (1.1)-(1.5) con la condición inicial $\phi^0(\mathbf{r}) \equiv 0$, y $J_i(\phi)$ es su concentración media (3.6) en Ω_i . Además, es conveniente elegir Q de tal manera que la masa total $F(Q)$ del limpiador descargado en el sistema acuático sea mínima. Por lo tanto, el problema de control óptimo se establece de la siguiente manera:

$$\text{minimizar } F(Q) = \sqrt{\int_0^T Q^2(t) dt} \text{ sujeto a: } J_i(\phi) = \bar{J}_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad Q \geq 0, \quad 0 \leq t \leq T.$$

Bibliografía

- Marchuk G.I. (1986). *Mathematical Models in Environmental Problems*. Elsevier, New York.
 Marchuk G.I. y Yu.N. Skiba (1976). *Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics* 12 (5), 279-284.
 Parra-Guevara D. y Yu.N. Skiba (2000). *Env. Modeling Assessment*. 5 (3), 177-184.
 Parra-Guevara D. y Yu.N. Skiba (2003). *Ecological Modelling*. 167 (3), 263-275.
 Parra-Guevara D. y Yu.N. Skiba (2006). *Mathemat. Computer Modelling*. 43, 766-778.
 Parra-Guevara D. y Yu.N. Skiba (2007). *Intern. J. Applied Math*. 20 (7), 1005-1026.
 Parra-Guevara D. y Yu.N. Skiba (2011). Ch. 7 en "Advances in Environmental Research", Vol.15, pp. 165-205 (Ed. J.A. Daniels), USA, NY, Nova Science Publishers.
 Parra-Guevara D., Yu.N. Skiba y F.N. Arellano (2011). *Intern. J. Applied Math*. (in press).
 Parra-Guevara D., Yu.N. Skiba y A. Pérez-Sesma (2010). *Intern. J. Applied Math*. 23, 549-569.
 Skiba Yu.N. (1993). *Rev. Intern. Contamin. Ambient*. 9 (2), 39-51.
 Skiba Yu.N. (1996). *Environmental Monitoring and Assessment* 43 (2), 139-151.
 Skiba Yu.N. (1997). *World Resource Review*. 9 (4), 542-556.
 Skiba Yu.N. (1999). *Environmental Monitoring and Assessment* 59 (1), 95-109.
 Skiba Yu.N. (2003). *Ecological Modelling*. 159 (2-3), 125-132.

- Skiba Yu.N. y V. Davydova-Belitskaya (2003). *Ecological Modelling*. 166, 169-184.
- Skiba Yu.N. y D. Parra-Guevara (1999). *Geofísica Internacional*. 38 (2), 117-124.
- Skiba Yu.N. y D. Parra-Guevara (2000). *Environmental Modeling Assessment*. 5 (3), 169-175.
- Skiba Yu.N. y D. Parra Guevara (2007). Ch. 10 en "Progress in Air Pollution Research", pp. 219-260
(Ed. Sergio P. Balduino), USA, NY, Nova Science Publishers.
- Skiba Yu.N., D. Parra Guevara y V. Davydova (2005). *Environ. Monitoring Assessment* 111, 89-112.