



ESPE
UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS
INNOVACIÓN PARA LA EXCELENCIA

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS EXACTAS

**MAESTRÍA EN ENSEÑANZA DE LA
MATEMÁTICA**

**TRABAJO DE TITULACIÓN, PREVIO A LA OBTENCIÓN
DEL TÍTULO DE MAGISTER EN ENSEÑANZA DE LA
MATEMÁTICA**

**TEMA: SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA
CONTAMINACIÓN AMBIENTAL DE ORIGEN PRIMARIO
EMITIDO POR FUENTES MÓVILES DE LA CIUDAD DE
QUITO**

AUTOR: Pilataxi Morales, Luis Jhon

DIRECTOR: MSc. Albuja Proaño, Guillermo Alexis

SANGOLQUÍ

2019



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS EXACTAS

MAESTRÍA EN ENSEÑANZA DE LA MATEMÁTICA.

CERTIFICACIÓN

Certifico que el trabajo de titulación "**Simulación Numérica de la Contaminación Ambiental de origen primario emitido por fuentes móviles de la ciudad de Quito**" realizado por el señor **Pilataxi Morales Luis Jhon**, ha sido revisado en su totalidad y analizado por el software anti-plagio, el mismo cumple con los requisitos teóricos, científicos, técnicos, metodológicos y legales establecidos por el Departamento de Ciencias Exactas de la Universidad de Fuerzas Armadas -ESPE, por lo tanto, se autoriza su presentación para fines legales pertinentes.

Sangolquí, diciembre del 2018

MSc. Guillermo Albuja P.

DIRECTOR DE TESIS



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS EXACTAS

MAESTRÍA EN ENSEÑANZA DE LA MATEMÁTICA.

AUTORÍA DE RESPONSABILIDAD

Yo, **LUIS JHON PILATAXI MORALES**, con cédula de identidad 1710217892, declaro que este trabajo de titulación "**Simulación Numérica de la Contaminación Ambiental de origen primario emitido por fuentes móviles de la ciudad de Quito**" ha sido desarrollado considerando los métodos de investigación existentes, así como también se ha respetado los derechos intelectuales de terceros considerándose en las citas bibliográficas.

Consecuentemente declaro que este trabajo es de mi autoría, en virtud de ello me declaro responsable del contenido, veracidad y alcance de la investigación mencionada.

Sangolquí, Diciembre del 2018

Luis Pilataxi M.

CC: 1710217892



DEPARTAMENTO DE CIENCIAS EXACTAS
MAESTRÍA EN ENSEÑANZA DE LA MATEMÁTICA.

AUTORIZACIÓN

Yo, **Pilataxi Morales Luis Jhon**, autorizo a la Universidad de las Fuerzas Armadas-ESPE publicar en la biblioteca Virtual de la institución el presente trabajo de titulación "**Simulación Numérica de la Contaminación Ambiental de origen primario emitido por fuentes móviles de la ciudad de Quito**" cuyo contenido, ideas y criterios son de mi autoría y responsabilidad.

Sangolquí, diciembre del 2018

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'Luis Pilataxi M.', written over a light blue rectangular background.

Luis Pilataxi M.

CC: 1710217892

DEDICATORIA

La presente tesis le dedico con todo mi amor y cariño a mi esposa María, por su sacrificio y esfuerzo al apoyarme a conseguir un escalón más en mi vida y estar convencida de mi capacidad, aunque hemos pasado momentos difíciles siempre me brindo apoyo y comprensión.

A mi hijo Jhon Iván por ser parte primordial de mi vida, ya que él es mi inspiración y ejemplo para perseverar y poder superarme cada día más.

A mi hija Madelyn por su paciencia y comprensión de no poder compartir con ella, quién con su carita de ángel me dijo palabras de motivación.

A mi hermana Jimena quién con sus palabras de aliento hizo que tome fuerzas para no decaer y así lograr cumplir con mi objetivo.

Gracias a Todos

AGRADECIMIENTO

Agradezco a Dios por haberme bendecido en mi vida para poder culminar con éxito una etapa más de mi vida.

A mi asesor de tesis. MSc. Guillermo Albuja Proaño, a él quiero expresar mi profunda gratitud por su orientación, motivación y dedicación. Además por haberme dado la oportunidad de compartir sus conocimientos científicos y demostrarme paciencia en todo el desarrollo de mi trabajo.

También quiero expresar mi agradecimiento al Dr. Hernán Benalcázar Gómez Ph.D profesor oponente, por el apoyo y dedicación de su tiempo para compartir sus conocimientos, experiencias y sugerencias que han sido de gran valía para concluir con éxito la tesis.

Además agradezco a mi hijo Jhon Iván por haber sido mi pilar fundamental con todo el apoyo científico -tecnológico, quién con su paciencia y tolerancia a pesar de mis dificultades emocionales presentadas, estuvo siempre presto para ayudarme y orientarme en el desarrollo de mi tesis.

Y al finalizar agradezco a toda mi familia , por haberme brindado de una u otra manera el apoyo incondicional para seguir adelante y crecer en mi carrera profesional.

ÍNDICE DE CONTENIDOS

| | |
|---|------------|
| CERTIFICACIÓN | i |
| AUTORÍA DE RESPONSABILIDAD | ii |
| AUTORIZACIÓN | iii |
| AGRADECIMIENTO | iv |
| DEDICATORIA | v |
| ÍNDICE | vi |
| ÍNDICE DE TABLAS | vi |
| ÍNDICE DE FIGURAS | vii |
| RESUMEN | ix |
| ABSTRACT | ix |
| INTRODUCCIÓN | 1 |
| OBJETIVOS | 2 |
| 1 CONTAMINACIÓN ATMÓSFERICA | 4 |
| 1.1 La atmósfera | 4 |
| 1.2 Contaminación ambiental | 5 |
| 1.3 Contaminación atmosférica | 6 |
| 1.4 Contaminantes del aire | 6 |
| 1.5 Fuentes de contaminación del aire | 7 |
| 1.5.1 Fuentes móviles de contaminación | 7 |
| 1.6 Descripción de los contaminantes atmosféricos más importantes | 9 |
| 1.6.1 Monóxido de carbono (CO) | 9 |
| 1.6.2 Dióxido de azufre (SO ₂) | 9 |
| 1.6.3 Óxido de nitrógeno (NO _x) | 9 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1.6.4 | Compuestos orgánicos volátiles (COVs) | 10 |
| 1.6.5 | Material particulado | 10 |
| 1.6.6 | Contaminación debido a fuentes móviles | 10 |
| 1.7 | Dispersión de contaminantes | 10 |
| 1.8 | Calidad del Aire | 11 |
| 1.8.1 | Índice de la calidad del aire (ICA) | 11 |
| 1.8.2 | Norma ecuatoriana de calidad de aire (NECA) | 11 |
| 1.8.3 | Índice quiteño de la calidad de aire (IQCA). | 12 |
| 1.9 | Calidad del aire de Quito | 14 |
| 1.9.1 | Red automático (RAUTO) | 14 |
| 1.9.2 | Red de monitoreo pasivo (REMPA) | 15 |
| 1.9.3 | Red de depósito (REDEP) | 16 |
| 1.9.4 | Red activa de material particulado (RAPAR) | 16 |
| 1.9.5 | Red meteorológica (REMET) | 16 |
| 2 | MODELOS DE CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA | 19 |
| 2.1 | Resultados Fundamentales del Análisis Vectorial | 19 |
| 2.1.1 | Definiciones matemáticas importantes | 19 |
| 2.1.2 | Volumen de control | 20 |
| 2.1.3 | Teorema de la divergencia de Gauss | 21 |
| 2.1.4 | Teorema fundamental del cálculo de variaciones | 22 |
| 2.1.5 | Teorema de Green-Gauss | 22 |
| 2.1.6 | Teorema de transporte de Reynolds | 23 |
| 2.1.7 | Ecuación de continuidad | 24 |
| 2.2 | Transporte por difusión | 25 |
| 2.2.1 | Primera ley de Fick. | 26 |
| 2.2.2 | Segunda ley de Fick | 27 |
| 2.3 | Transporte por advección. | 27 |
| 2.4 | Ecuación de transporte | 28 |
| 2.5 | Ecuación de advección – difusión | 28 |
| 2.6 | Elemento reactivo | 29 |
| 2.7 | Ecuación de convección –difusión-reacción | 29 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 2.8 | Condiciones iniciales | 29 |
| 2.9 | Condiciones de frontera. | 29 |
| 2.9.1 | Condición de Dirichlet | 30 |
| 2.9.2 | Condición de Neumann | 30 |
| 2.9.3 | Condición de Rubín | 30 |
| 3 | ESPACIOS FUNCIONALES IMPORTANTES | 31 |
| 3.1 | Espacios normados | 31 |
| 3.2 | Espacios de Hilbert | 32 |
| 3.3 | Aplicaciones lineales continuas | 33 |
| 3.4 | Formas bilineales continuas | 35 |
| 3.4.1 | Lema de Lax-Milgran | 35 |
| 3.5 | Espacios $L^p(\Omega)$ | 36 |
| 3.5.1 | Reflexividad. Separabilidad. Dual de L^p | 37 |
| 3.5.2 | Nociones de convergencia en $L^p(\Omega)$ | 37 |
| 3.6 | Espacio de distribuciones | 38 |
| 3.6.1 | Funciones test | 38 |
| 3.6.2 | El espacio $D'(\Omega)$ | 39 |
| 3.6.3 | Convergencia | 40 |
| 3.6.4 | Derivación en el sentido de las distribuciones | 40 |
| 3.7 | Espacios de Sobolev | 41 |
| 4 | ANÁLISIS DEL MODELO Y DISCRETIZACIÓN | 42 |
| 4.1 | Formulación del problema | 42 |
| 4.1.1 | Condición inicial | 43 |
| 4.1.2 | Condiciones de frontera | 43 |
| 4.2 | Formulación débil del problema | 44 |
| 4.3 | Existencia y unicidad de la solución | 46 |
| 4.3.1 | Lema de Gronwall | 46 |
| 4.3.2 | Teorema de J. L. Lions | 46 |
| 4.4 | Existencia de la solución de (P) | 47 |
| 4.5 | Unicidad de la solución de P | 49 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 4.6 | Discretización espacial | 51 |
| 4.6.1 | Método de elementos finitos | 51 |
| 4.6.2 | Breve historia del método de elementos finitos | 51 |
| 4.6.3 | Descripción matemática del método | 52 |
| 4.6.4 | Discretización del dominio | 53 |
| 4.6.5 | Método de Galerkin | 56 |
| 5 | SIMULACIÓN NUMÉRICA | 68 |
| 5.1 | Introducción | 68 |
| 5.1.1 | Pdetoool de Matlab | 68 |
| 5.1.2 | FreemFem++ | 69 |
| 5.2 | Área de estudio | 69 |
| 5.2.1 | Definición de la zona de estudio. | 69 |
| 5.2.2 | Estaciones de monitoreo | 70 |
| 5.2.3 | Selección de los puntos de conteo del flujo vehicular | 71 |
| 5.2.4 | Contorno del dominio de estudio | 73 |
| 5.3 | Cálculo de emisiones | 74 |
| 5.4 | Datos de entrada para el modelo matemático de difusión-reacción | 75 |
| 5.4.1 | Función condición inicial | 75 |
| 5.4.2 | Función fuentes de emisión | 76 |
| 5.4.3 | Coefficientes de difusión. | 78 |
| 5.5 | Construcción del contorno y mallado del dominio de Ω | 79 |
| 5.5.1 | En Matlab. | 79 |
| 5.5.2 | En Fremfee++ | 80 |
| 5.6 | Simulación de la dispersión de contaminantes en el aire | 82 |
| 5.6.1 | Dióxido de Nitrógeno | 83 |
| 5.6.2 | Monóxido de Carbono | 87 |
| 6 | CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES | 90 |
| 6.1 | Conclusiones | 90 |
| 6.2 | Recomendación. | 90 |
| | REFERENCIAS | 92 |

ÍNDICE DE TABLAS

| | | |
|-----------------|---|----|
| Tabla 1 | <i>Composición aire seco</i> | 5 |
| Tabla 2 | <i>Contaminantes del aire</i> | 8 |
| Tabla 3 | <i>Límites de concentración de contaminantes</i> | 12 |
| Tabla 4 | <i>Categorías IQCA</i> | 13 |
| Tabla 5 | <i>Individuos sensibles</i> | 13 |
| Tabla 6 | <i>Dirección de estaciones de monitoreo</i> | 17 |
| Tabla 7 | <i>Contaminantes medidos a través de las fuentes de monitoreo</i> | 18 |
| Tabla 8 | Coordenadas cartesianas de las estaciones de monitoreo | 71 |
| Tabla 9 | Coordenadas cartesianas de los puntos de flujo vehicular | 72 |
| Tabla 10 | <i>Coordenadas cartesianas de los puntos del contorno</i> | 74 |
| Tabla 11 | <i>Función condición inicial NO</i> | 76 |
| Tabla 12 | <i>Función condición inicial CO</i> | 76 |
| Tabla 13 | <i>Función fuente de emisión para NO₂</i> | 77 |
| Tabla 14 | <i>Función fuente de emisión de CO</i> | 78 |

ÍNDICE DE FIGURAS

| | | |
|------------------|---|----|
| <i>Figura 1</i> | Ubicación de los analizadores automáticos | 4 |
| <i>Figura 2</i> | Ubicación de los analizadores automáticos | 15 |
| <i>Figura 3</i> | Ubicación de los analizadores automáticos | 16 |
| <i>Figura 4</i> | Transporte difusivo | 26 |
| <i>Figura 5</i> | Transporte advectivo | 28 |
| <i>Figura 6</i> | Condición de frontera de Dirichlet | 30 |
| <i>Figura 7</i> | Mallado triangular | 54 |
| <i>Figura 8</i> | Elementos conectados en i | 55 |
| <i>Figura 9</i> | Mallado y numeración | 55 |
| <i>Figura 10</i> | Mallado triangular y numeración | 58 |
| <i>Figura 11</i> | Númeración de los vértices | 59 |
| <i>Figura 12</i> | Función de la base V_h | 59 |
| <i>Figura 13</i> | Vértices | 61 |
| <i>Figura 14</i> | Númeración del mallado | 63 |
| <i>Figura 15</i> | Ejemplo | 63 |
| <i>Figura 16</i> | Interface de PdeTool | 68 |
| <i>Figura 17</i> | Ubicación del Punto de referencia | 70 |
| <i>Figura 18</i> | Ubicación de las estaciones de monitoreo | 71 |
| <i>Figura 19</i> | Ubicación de los puntos seleccionados del flujo vehicular | 73 |
| <i>Figura 20</i> | Ubicación de los puntos del contorno del dominio | 74 |
| <i>Figura 21</i> | Descripción del dominio empleando Matlab | 79 |
| <i>Figura 22</i> | Representación gráfica del contorno empleando Matlab | 80 |
| <i>Figura 23</i> | Mallado empleando Matlab | 80 |
| <i>Figura 24</i> | Descripción del dominio empleandoFremfee++ | 81 |
| <i>Figura 25</i> | Representación gráfica del contorno empleando Fremfee++ | 81 |
| <i>Figura 26</i> | Mallado empleando Fremfee++ | 82 |
| <i>Figura 27</i> | Ecuación de difusión-reacción | 83 |
| <i>Figura 28</i> | Ingreso de condiciones iniciales | 83 |
| <i>Figura 29</i> | Ingreso de función de condiciones iniciales | 84 |

| | | |
|------------------|---|----|
| Figura 30 | NO2 para 1 mes Matlab (izq.) - FremFee+ (der.) | 84 |
| Figura 31 | NO2 para 3 meses Matlab (izq.) - FremFee+ (der.) | 85 |
| Figura 32 | NO2 para 6 meses Matlab (izq.) - FremFee+ (der.) | 85 |
| Figura 33 | NO2 para 12 meses Matlab (izq.) - FremFee+ (der.) | 86 |
| Figura 34 | NO2 para 15 meses Matlab (izq.) - FremFee+ (der.) | 86 |
| Figura 35 | CO para 1 mes Matlab (izq.) - FremFee+ (der.) | 87 |
| Figura 36 | CO para 3 meses Matlab (izq.) - FremFee+ (der.) | 87 |
| Figura 37 | CO para 6 meses Matlab (izq.) - FremFee+ (der.) | 88 |
| Figura 38 | CO para 12 meses Matlab (izq.) - FremFee+ (der.) | 88 |
| Figura 39 | CO para 15 meses Matlab (izq.) - FremFee+ (der.) | 89 |

RESUMEN

La contaminación del aire se produce por las emisiones vehiculares esto es un problema de gran importancia en las principales ciudades del mundo, debido a que provoca daños en la salud y afecta al medio ambiente. La ecuación en derivadas parciales del tipo reacción-difusión es la que modela la dispersión de las sustancias en la atmósfera. Debido a la complejidad del problema no es posible en general obtener una solución analítica de la ecuación, por lo que los métodos numéricos son ideales. En el presente trabajo se presenta la simulación numérica de la contaminación atmosférica causada por elementos móviles (autos) en la ciudad de Quito. La simulación se lo realizó utilizando el método de elementos finitos, para ello se emplea dos herramientas el toolbox PDETOOL de Matlab y FREMFEE++, con el objetivo de comparar los resultados. Para ello fue necesario la construcción de la frontera del dominio de estudio sobre la zona urbana de la ciudad, luego en base a los datos obtenidos, acerca la concentración de los contaminantes en la atmósfera y el flujo vehicular, se construye las funciones de condición inicial y fuentes de emisión que son utilizados el modelo matemático de difusión-reacción. Por medio de esta investigación se ha determinado que en parte norte de la ciudad existe mayor concentración de contaminantes tanto del CO como el NO₂ debido a que se tiene mayor flujo vehicular.

PALABRAS CLAVES:

CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA

EMISIONES VEHICULARES

ECUACIÓN DE DIFUSIÓN-REACCIÓN

SIMULACIÓN NUMÉRICA

MÉTODOS DE ELEMENTOS FINITOS

ABSTRACT

The Air pollution is produced by vehicle emissions so it is a huge problem in the principle cities of the world. It provokes health damages and affects the environment. The equation in partial derivatives of type reaction-diffusion is that models the dispersion of substances in the atmosphere. Due to complexity of the problem, it is not possible to obtain an analytical solution of the equation therefore, the numerical methods are ideal. This work presents the numerical simulation of the atmospheric pollution that is caused by mobile elements (cars) in the Quito City. The simulation was done using the finite element method so it is used two tools the toolbox PDETOOL of Matlab and FEMFEE ++, in order to compare results. So, it was necessary to build the border of study about the urban area of the city after according to, the data that were gotten about gathering of the pollutants in the atmosphere and the vehicle flow. For this reason, it was necessary to build the functions of initial condition and sources of emission that are used in the mathematical model of diffusion-reaction. In conclusion, this investigation has determined that in part of the north of the city exists major concentration of pollutant like the CO and NO₂ due to greater vehicular flow.

KEY WORDS:

AIR POLLUTION

VEHICLE EMISSIONS

DIFFUSION-REACTION EQUATION

NUMERICAL SIMULATION

FINITE ELEMENT METHOD

INTRODUCCIÓN

La contaminación del aire es un problema ambiental que ha existido desde la época del hombre primitivo, cuando este encendía fogatas en sus cuevas contaminando su entorno con humo nocivo. Con el pasar del tiempo este problema se fue agravando, es así que en el año 61 A. C. el filósofo romano Séneca describió el "aire cargado de Roma" para referirse al ambiente de la ciudad. Más tarde, en el siglo XI se prohibió la quema de carbón en Londres, debido a la excesiva presencia de humo en el ambiente (Ambientalista, 2017). A partir del siglo XVIII con la revolución industrial el problema de contaminación se agrava debido al uso de combustibles fósiles y años después se agudiza por el uso del automóvil. En la actualidad la calidad del aire se ve afectado por el incremento de las actividades industriales, el tráfico vehicular, y las malas prácticas ambientales.

La contaminación atmosférica es uno de los problemas que se ha generado en el mundo y la ciudad de Quito no es la excepción, esto se debe a la presencia de una o varias sustancias extrañas en el aire, en cantidades suficientes, durante períodos de tiempo como para afectar a la salud de las personas y el medio ambiente. Según Organización Mundial de la Salud (OMS) más de 6 millones de personas mueren cada año por enfermedades relacionadas con la contaminación atmosférica, lo que es equivalente a 1 de cada 9 muertes (OMS,2016).

El incremento del parque automotriz en la ciudad de Quito, está afectando en la calidad del aire, debido al aumento de las emisiones de contaminantes atmosféricos. Actualmente, es necesario reducir las emisiones de origen antropogénico, para mejorar la calidad del aire que se respira.

Muchos problemas físicos de la naturaleza como la contaminación atmosférica, están descritos por ecuaciones en derivadas parciales (EDP). La ecuación de difusión-reacción es de especial interés en el presente trabajo para el estudio de la dispersión de contaminantes a través del aire hacia la atmósfera.

Para la mayoría de las EDP con las que nos enfrentamos, encontrar una solución analítica exacta es demasiado complejo o no nos es posible encontrarla, no están en la meta de este trabajo. Es por ello que nos vemos obligados a resolverlo de forma aproximada mediante métodos numéricos, una herramienta muy utilizada es el método de elementos finitos (MEF).

La simulacion numerica se lo realiza utilizando PDEtool que es una herramienta de Matlab, con el objetivo de validar y comparar los resultados se utiliza el Software Freefem++. En el presente trabajo se realizó la simulación numérica de dos contaminantes de origen primario emitidos por fuentes móviles como el monóxido de carbono (CO) y el dióxido de nitrógeno (NO₂).

El presente trabajo esta dividido de la siguiente manera. En el capítulo 1, se brinda definiciones de atmósfera, contaminación atmosférica, contaminantes del aire, tipos de contaminantes, fuentes de contaminación haciendo énfasis en las fuentes móviles, se realiza una descripción de los principales contaminantes de origen primario. Finalmente, se describe sobre la red de monitoreo con la que cuenta el Distrito Metropolitano de Quito.

El capítulo 2, se estudian ciertos resultados de la mecánica de fluidos, básicamente los teoremas de Gauss, de Green Gauss, de transporte de Reynolds y finalmente de tratarán la leyes fundamentales que rigen los medios continuos.

En el capítulo 3, se tratan los resultados fundamentales de los espacios funcionales tales como los espacios de Banach, de Hilbert, el espacio de las aplicaciones lineales continuas, los espacios $L^p(\Omega)$, el espacio de las distribuciones, los espacios de Sobolev y el teorema de Lax-Milgran, aunque sin demostraciones.

El capítulo 4, capítulo 4, se exponen los resultados de existencia y unicidad para la solución de la ecuación de transporte de reacción-difusión, luego se estudia la discretización mediante el método de elementos finitos y el método de Galerkin.

En capítulo 5, se presenta la simulación de los contaminantes CO y NO₂ desarrolladas en Matlab con su herramienta Pdetool, para contrarrestar los resultados se utiliza Freefem++. Para ello se cuenta con los datos del flujo vehicular y las concentraciones de los contaminantes de las estaciones de monitoreo. Finalmente en el capítulo 6, se presentan las conclusiones y recomendaciones.

OBJETIVOS.

El objetivo principal de la presente investigación es:

Determinar y analizar los grados de contaminación del monóxido de carbono (CO) y del dióxido de nitrógeno (NO₂) contaminantes de origen primario de fuentes móviles mediante simulación numérica a través de un modelo matemático de difusión- reacción usando la herramienta PdeTool de Matlab y el software FreeFem++.

Para la consecución de la meta trazada es necesario plantear los siguientes objetivos específicos.

- *Formular el modelo matemático bidimensional de contaminación del aire.*
- *Recolectar información de los parámetros que intervienen en el modelo matemático de difusión-reacción.*
- *Simular numéricamente las concentraciones de CO y NO₂.*
- *Analizar y comparar los resultados obtenidos a través de las herramientas empleadas.*

CAPÍTULO 1

CONTAMINACIÓN ATMÓSFERICA

En el presente capítulo se presenta definiciones relacionados con el problema de estudio como de atmósfera, contaminación atmosférica, contaminantes del aire, tipos de contaminantes, fuentes de contaminación haciendo énfasis en las fuentes móviles, se realiza una descripción de los principales contaminantes de origen primario. Finalmente, se describe sobre la red de monitoreo con la que cuenta el Distrito Metropolitano de Quito.

1.1 La atmósfera

La atmósfera es una capa compuesta por una mezcla de gases, partículas y aerosoles que envuelve a la tierra cuyas proporciones relativas se mantienen constantes hasta una altura aproximada de 25 Kilómetros. En los primeros 5 kilómetros de altura se encuentran las capas bajas de la atmósfera, en ella se concentra la mitad de su masa total y en la cual se producen los fenómenos meteorológicos y las reacciones químicas, cualquier alteración sobre ella, ocasiona problemas en los seres vivos.

La composición química y la temperatura de la atmósfera varían en función de la altura, es por ello que la atmósfera se divide en cuatro capas: tropósfera, estratósfera, mesósfera, termósfera y exósfera, como se puede apreciar en la figura 1.

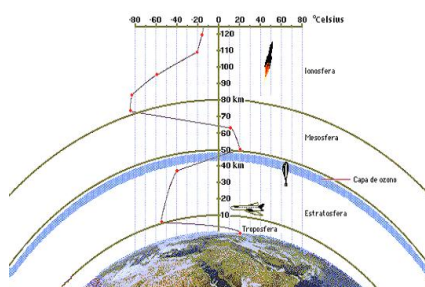


Figura 1. Ubicación de los analizadores automáticos

Fuente: (Guanche, 2013)

Para el estudio de la contaminación atmosférica, es de interés únicamente la capa inferior, en la cual se producen las transformaciones químicas de los contaminantes y fenómenos de transporte que estudiaremos posteriormente. El aire que respiran los seres vivos se encuentra en la tropósfera, y constituye una mezcla gaseosa que permanece alrededor de la superficie terrestre debido a la acción de la fuerza de gravedad (Ambientalista, 2017). En la tabla 1 se muestra la composición del aire puro.

Tabla 1.
Composición aire seco

| Componente | Símbolo Químico | Concentración aproximada |
|--------------------|-----------------|--------------------------|
| Nitrógeno | N_2 | 78.03 % |
| Oxígeno | O_2 | 20.99 % |
| Dióxido de Carbono | CO_2 | 0.03 % |
| Argón | Ar | 0.94 % |
| Neón | Ne | 0.00123 % |
| Helio | He | 0.0004 % |
| Criptón | Kr | 0.00005 % |
| Xenón | Xe | 0.000006 % |
| Hidrógeno | H_2 | 0.01 % |
| Metano | CH_4 | 0.0002 % |
| Oxido Nitroso | N_2O | 0.00005 % |
| Vapor de Agua | H_2O | Variable |
| Ozono | O_3 | Variable |
| Partículas | | Variable |

Fuente: (Guanche, 2013)

La atmósfera terrestre contiene varios gases tales como: Ozono (O_3), Dióxido de azufre (SO_2), Dióxido de nitrógeno (NO_2), el Monóxido de carbono (CO) y una amplia gama de COV (compuestos orgánicos volátiles) que cuando sus concentraciones son mayores a los normales, son venenosos para los seres humanos, animales y dañinos para la plantas (Guanche, 2013). Existiendo además algunos gases carcinógenos, como el benceno y el butadieno. Además de estos gases, la atmósfera contiene material particulado conformado por una variedad de partículas entre sólidas y líquidas, cuyo tamaño varía desde unos cuantos nanómetros hasta 0,5 milímetros.

1.2 Contaminación ambiental

Actualmente, la contaminación ambiental representa un problema muy grave para la salud humana y el medio ambiente, y se produce cuando se tiene la presencia de cualquier agente físico, químico o biológico, o bien, cuando hay la combinación de varios de estos agentes en formas y concentraciones que sean o no nocivos para la salud, seguridad o

bienestar de la población, animales y plantas; además la contaminación ambiental puede producir daños materiales, alterar el clima, etc. (Ambientalista, 2017). Existen al menos tres tipos de contaminación ambiental: contaminación del agua, contaminación del suelo y contaminación del aire o atmosférica.

1.3 Contaminación atmosférica

Se puede decir que la contaminación atmosférica ocurre cuando se tiene la presencia de sustancias sólidas, líquidas o gaseosas en el aire en concentraciones mayores a su nivel normal, de tal manera que puede causar daños a los seres humanos, a los animales, a las plantas o a los bienes materiales (EPA,2017). Algunos de estos contaminantes son emitidos a la atmósfera como resultado de procesos naturales como las erupciones volcánicas, los incendios forestales, etc. Mientras que otros tienen un origen antropogénicas, es decir, producidas por la actividad humana (Bustos, 2010).

En la actualidad a la contaminación atmosférica se lo ha considerado como un problema de salud pública que afecta tanto a los países desarrollados como en aquellos en vías de desarrollo. Los gases más comunes de la contaminación de aire emitidos por los vehículos en circulación son: el monóxido de carbono, el dióxido de carbono, el dióxido de azufre, compuestos orgánicos volátiles, material particulado y los óxido de nitrógeno producidas por la industria (OMS,2016).

1.4 Contaminantes del aire

Se consideran contaminantes del aire a las sustancias y formas de energía que potencialmente pueden producir riesgos, daños o molestias graves a las personas o al medio ambiente en determinadas circunstancias. Se dividen en dos grupos, dependiendo si han sido emitido desde una fuente conocida o se han formado en la atmósfera, tenemos:

Contaminantes primarios.

Son sustancias que tienen carácter de contaminante y son vertidas directamente a la atmósfera desde las fuentes de emisión conocidas, provocando alteraciones en la calidad del aire. Los principales son: óxido de azufre, óxidos de nitrógeno, monóxido de carbono, hidrocarburos no combustionados, material particulado menor a 10 micras, y menor a 2.5 micras.

Contaminantes secundarios.

Son sustancias que no se vierten directamente a la atmósfera desde las fuentes de emisión, sino que se forman en ella como consecuencia de las reacciones químicas de los contaminantes primarios con los gases atmosféricos habituales de la atmósfera, los más importantes son el ácido sulfúrico H_2SO_4 , cuya formación comienza por la oxidación del SO_2 :



1.5 Fuentes de contaminación del aire

El lugar donde se origina la emisión se denomina, fuente. Las fuentes de contaminación del aire se clasifican en naturales y antropogénicas. Los fenómenos como erupciones volcánicas, tormentas de arena, incendios forestales, descomposición de la materia orgánica, etc. Se consideran contaminantes atmosféricos de origen natural, y se encuentran distribuidas irregularmente por todo el planeta.

Las emisiones que son consecuencia de las actividades humanas debido al uso de combustible fósil (carbón, petróleo y gas), se denominan contaminantes atmosféricos de origen antropogénica. Siendo puntuales, de área y móviles. Las emisiones provenientes del transporte debido a la combustión de los vehículos generan una gran cantidad de contaminantes atmosféricos, siendo el automóvil el que genera mayor contaminación, esto depende de la clase de combustible utilizado, del tipo de motor, el uso de catalizadores y la densidad del tráfico.

1.5.1 Fuentes móviles de contaminación

Son aquellas que emiten contaminantes mientras se encuentran en movimiento, como ejemplos tenemos el transporte urbano como: automóviles, buses, camiones que circulan por las calles y carreteras. Los motores de combustión interna usados en vehículos, tanto de gasolina como de diesel, emiten gases como monóxido de carbono, hidrocarburos, óxido de nitrógeno, dióxido de azufre y partículas en suspensión. En la tabla 2 se presenta un resumen de los principales contaminantes atmosféricos. Describiendo sus características y los efectos que producen sobre la salud de las personas.

Tabla 2.
Contaminantes del aire

| Contaminante | Fuente | Características | Efectos |
|---------------------------------|--|--|--|
| Monóxido de Carbono (CO) | Combustión incompleta de gasolina | Gas incoloro, inodoro. insípido | Reemplaza al oxígeno en la unión O_2 – <i>hemoglobina</i> produciendo muerte celular |
| Dióxido de Carbono (CO_2) | Combustión de productos orgánicos | Gas, incoloro, inodoro. insípido | Efecto invernadero, cambio climático |
| Dióxido de Azufre (SO_2) | Combustión de carbón y petróleo, volcanes | Gas, incoloro, olor fuerte e irritante, no inflamable | Contribuye a la lluvia ácida |
| Trióxido de Azufre (SO_3) | Reacciones del SO_2 con O_2 | Secundario | Contribuye a la lluvia ácida |
| Óxido Nitroso (N_2O) | Descomposición de materia orgánica nitrogenada | Gas inerte, anestésico | Destrucción de la capa de ozono |
| Dióxido de Nitrico (NO) | Acción biológica y procesos de combustión | Incoloro, inodoro, tóxico en elevadas concentraciones | Contaminación fotoquímica |
| Dióxido de Nitrogeno (NO_2) | Combustión a elevadas temperaturas de petróleo, y gasolina | Irritante, precursor de O_3 | Luvia ácida, contaminación fotoquímica |
| Ozono (O_3) | Reacciones químicas de sus precursores | Secundario | Smog fotoquímico, irritación en los ojos, y membranas mucosas |
| Benceno | Líquido, incoloro, muy infamable, aroma dulce | Incendios forestales, quema de gasolina, cigarrillo | Somnolencia, mareo, taticardia, daños en el sistema inmunario |
| Cadmio | Metal, se combina fácilmente con el oxígeno | Producción de metales, baterías, plásticos, humo de cigarrillo | Puede provocar cáncer |
| Polvos, humos, nieblas | Natural antropogénico | Transporta otros contaminantes | Afecta a las vías respiratorias |

Fuente: (Guanche, 2013)

1.6 Descripción de los contaminantes atmosféricos más importantes

1.6.1 Monóxido de carbono (CO)

El CO es un contaminante primario emitido por fuentes antropogénicas, se caracteriza por ser un gas incoloro, inodoro e insípido; es el resultado de procesos de combustión incompleta de la gasolina en los motores de los vehículos (OMS,2016), pero también hay contribuciones significativas de industrias y centrales de producción de energía.

La concentración ambiental en una atmósfera limpia es inferior a $200 \text{ ug}/\text{m}^3$, pero en una atmósfera contaminada puede ser superior a $30000 \text{ ug}/\text{m}^3$, el tiempo de permanencia es de un mes.

1.6.2 Dióxido de azufre (SO₂)

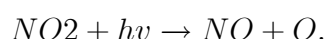
El SO₂ es un contaminante primario formado por partículas de azufre y oxígeno, son gases incoloros y no inflamables con un olor fuerte e irritable; es emitido a la atmósfera por actividades humanas sobre todo por la combustión del carbón y petróleo en los procesos industriales, tráfico de vehículos y calderas de calefacción (OMS,2016), su vida media en la atmósfera es de 2 a 4 días, casi la mitad se vuelve a depositarse en la superficie.

1.6.3 Óxido de nitrógeno (NO_x)

El NO_x es un contaminante tanto primario como secundario, formado por partículas de nitrógeno y oxígeno, son gases incoloros. En la atmósfera existe una gran variedad de este tipo de compuesto en cantidades apreciables, de ellos los que son estudiados en la calidad del aire son: monóxido de nitrógeno (NO) y el dióxido de nitrógeno (NO₂) (OMS,2016).

El NO es un gas incoloro e inodoro, tóxico a altas concentraciones, es producido por acción biológica y en los procesos de combustión. El tiempo de residencia es de 5 días, además es un gas de efecto invernadero.

El NO₂ es uno de los contaminantes atmosféricos más peligrosos debido a su carácter irritante y porque se descompone por medio de la luz solar según la reacción:



Las fuentes de emisión de NO_x son de origen antropogénica, se originan en combustiones a elevadas temperaturas tanto en fuentes fijas como móviles. La concentración ambiental en una atmósfera limpia es de $2 \text{ ug}/\text{m}^3$, mientras que en atmósferas contaminadas tiene concentraciones superiores a $400 \text{ ug}/\text{m}^3$.

1.6.4 Compuestos orgánicos volátiles (COVs)

Los COVs son contaminantes compuestos formados por una partícula de carbono y una de las siguientes moléculas como hidrógeno, halógenos, oxígeno y smog fotoquímico, son compuestos producidos de forma natural, contribuyen a la formación de ozono y smog fotoquímico (OMS,2016).

1.6.5 Material particulado

El material particulado está compuesto por partículas sólidas y líquidas minúsculas que se origina de la quema incompleta de combustible. Los motores a diésel producen más partículas que los motores a gasolina (OMS,2016).

Las partículas más grandes no permanecen en la atmósfera por mucho tiempo ya que se depositan cerca de las fuentes de emisión, mientras que las más pequeñas pueden desplazarse grandes distancias o pueden ingresar al organismo mediante la respiración. En una atmósfera limpia su concentración es de 10 a 20 ug/m^3 , mientras que en una atmósfera contaminada puede superar los 500 ug/m^3 .

1.6.6 Contaminación debido a fuentes móviles

En las grandes ciudades del mundo, entre ellas la ciudad de Quito una de las principales fuentes de contaminación atmosférica la constituyen los vehículos debido a que han ido aumentando en los últimos años. Los principales contaminantes emanados por los vehículos debido al tipo de combustible que utilice y al tipo de motor que posea son:

- Monóxido de carbono (CO)
- Óxidos de nitrógeno (NO_x)
- Hidrocarburos no quemados (HC)

1.7 Dispersión de contaminantes

Los contaminantes atmosféricos primarios una vez que se encuentran en la atmósfera participan en un conjunto de procesos de transporte, mezcla y transformaciones químicas dando lugar a una distribución de su concentración tanto en el espacio como en el tiempo. La cantidad de contaminantes existentes en un momento dado está determinado por:

$$[Contaminación\ neta] = [emisión] - [autodepuración].$$

Los procesos de autodepuración son: difusión y transporte, transformaciones químicas y deposición. Estos procesos pueden actuar conjuntamente o por separado, y se describen en el siguiente capítulo.

1.8 Calidad del Aire

1.8.1 Índice de la calidad del aire (ICA)

La salud de los seres humanos se ve afectada, en parte, por la calidad de aire que respiramos. En efecto, la contaminación atmosférica urbana aumenta el riesgo de padecer enfermedades respiratorias agudas, como la neumonía, y crónicas como el cáncer del pulmón, las enfermedades cardiovasculares, disminución de la visibilidad, irritación de la garganta, ojos, entre otros. Se calcula que en el mundo suman 1,3 millones las personas que mueren en un año debido a estas causas (OMS,2016).

Debido a que la contaminación del aire es un problema de salud pública, OMS en el año 2005 determina las directrices sobre la calidad del aire (OMS,2005), ofreciendo orientaciones generales relativas a umbrales y límites para contaminantes atmosféricas clave que entrañan riesgos sanitarios. Una de las directrices menciona que si se reduce la contaminación de partículas (PM_{10}) de 70 a 20 microgramos por metro cúbico de aire (ug/m^3) es posible reducir en un 15% en número de muertes vinculadas con la contaminación ambiental.

1.8.2 Norma ecuatoriana de calidad de aire (NECA)

En base a las directrices de la OMS, cada país establece las normas de calidad del aire para proteger la salud de sus habitantes, considerando su realidad social, técnica y económica. Es por ello, en nuestro país se dispone de la norma ecuatoriana de calidad de aire (Neca,2011). El objetivo de esta norma es preservar la salud de las personas, la calidad del aire, y el bienestar de los ecosistemas. Los contaminantes considerados son: material particulado de diámetro menor a 10 micrones (PM_{10}), y menor a 2.5 micrones ($PM_{2.5}$), dióxido de nitrógeno, dióxido de azufre, monóxido de carbono, ozono, benceno, cadmio y material inorgánico como contaminantes no convencionales con efectos tóxicos y/o cancerígenos.

La NECA establece tres niveles de concentración (alerta, alarma y emergencia) de los contaminantes, como se puede apreciar en la tabla 3, los valores de concentración son expresado en microgramos por metro cúbico de aire (ug/m^3), a condiciones de $25^{\circ}C$ y 760 mmHg .

Tabla 3.*Límites de concentración de contaminantes*

| Contaminante | Período en horas de medición de concentración | Alerta | Alarma | Emergencia |
|-------------------------|--|---------------|---------------|-------------------|
| <i>CO</i> | Promedio en 8 | 15000 | 3000 | 40000 |
| <i>O₃</i> | Promedio en 8 | 200 | 400 | 600 |
| <i>NO₂</i> | Promedio en 1 | 1000 | 2000 | 3000 |
| <i>SO₂</i> | Promedio en 24 | 200 | 1000 | 1800 |
| <i>PM₁₀</i> | 24 | 250 | 400 | 550 |
| <i>PM_{2,5}</i> | 24 | 150 | 250 | 350 |

Fuente: (ICA, 2015)

1.8.3 Índice quiteño de la calidad de aire (IQCA).

En la ciudad de Quito en el año de 1999, ya se había reportado concentraciones de partículas en suspensión superiores a la norma de calidad del aire, en los sectores sur y norte con un alto porcentaje mayor a la norma de monóxido de carbono (CO) (Ministerio de ambiente, 2010), debido a la problemática de contaminación de la ciudad, en febrero de 2004, se creó la corporación para el mejoramiento del aire de Quito (CORPAIRE), y se creó el índice Quiteño de la calidad de aire, el cual se determina mediante las mediciones realizadas por los diferentes analizadores automáticos distribuidos en la ciudad (Secretaría Ambiente, 2017).

El IQCA es un valor numérico comprendido entre 0 y 500. Donde mientras más alto es el valor del IQCA, mayor es el nivel de contaminación atmosférica y como consecuencia, es más peligroso para la salud de las personas. El índice divide en diferentes rangos identificados con diferentes colores como puede apreciarse en la tabla 4.

El IQCA asigna un valor de 100 a los límites máximos permitidos en la Norma Nacional de calidad de aire para los distintos contaminantes, para valores intermedios se tienen concentraciones menores a los límites máximos permitidos.

Tabla 4.
Categorías IQCA

| Rangos | Categoría | Condición para salud | Color |
|---------------|------------------|--|--------------|
| 0-50 | Deseable | Óptima, sin riesgo para la salud | Blanco |
| 50-100 | Aceptable | Buena | Verde |
| 100-200 | Precaución | No saludable para individuos enfermos crónicos y convalecientes | Gris |
| 200-300 | Alerta | No saludable para individuos sensibles | Amarillo |
| 300-400 | Alarma | No saludable para la mayoría de la población y peligrosa para individuos sensibles | Naranja |
| 400-500 | Emergencia | Peligrosa para toda la población | Rojo |

Fuente:(Secretaria Ambiente, 2017)

En la tabla 5 se detalla las personas pertenecientes al término individuos sensibles, el cual es empleado en la tabla 4, esta clasificación se ha elaborado mediante información de la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos.

Tabla 5.
Individuos sensibles

| Contaminante | Individuos sensibles |
|----------------------|---|
| Ozono | Personas que realizan actividades en exteriores, e individuos con enfermedades respiratorias |
| Material particulado | Personas con enfermedades de los pulmones o el corazón, tales como asma, obstrucción pulmonar, congestiones cardiacas. |
| Monóxido de carbono | Personas con enfermedades cardiovasculares , cerebro vasculares, mujeres embarazadas, bebes en gestación o recién nacidos |
| Dióxido de azufre | Personas con enfermedades respiratorias crónicas , personas que realizan actividad física en exteriores |
| Dióxido de nitrógeno | Personas con enfermedades respiratorias como el asma |

Fuente: (Secretaria Ambiente, 2017)

El Municipio de Quito, por medio de la secretaría de Ambiente de acuerdo al informe de la Red Metropolitana de Monitoreo Atmosférico (REMMQ), emite un informe anual, da a conocer a las autoridades y a la ciudadanía en general, información confiable sobre la calidad del aire, para hacer realidad el derecho de la población a vivir en un ambiente sano y, de esta manera, contribuir al mejoramiento de su calidad de vida. La información se obtiene de las estaciones ubicadas en el área urbana de la ciudad de Quito y los valles aledaños, las mismas que miden de manera continua la concentración en el aire de cinco contaminantes como son, el material particulado ($PM_{2.5}$ y PM_{10}), dióxido de nitrógeno (NO_2), dióxido de azufre(SO_2), monóxido de carbono (CO) y oxidantes fotoquímicos expresados como ozono (O_3) (Cevallos, Díaz, y Sioris, 2017).

La zona urbana de la ciudad de Quito esta localizada en la parte occidental de la cordillera de los Andes, rodeada de montañas que dificultan su ventilación, esta zona tiene una altura media de 2.810 metros sobre el nivel del mar (msnm); el resto de la ciudad presenta altura variables que va desde los 400 hasta los 5.720 msnm. (Secretaría de Ambiente, 2010). La Red Metropolitana de Monitoreo Atmosférico de Quito (REMMQ) desde el 2003 emplea nueve estaciones automáticas de fondo urbano para determinar el Índice Quiteño de la Calidad del Aire, y en el 2005 se incrementaron estaciones complementarias manuales de fondo urbano, regional y de nivel de calle (Secretaria Ambiente, 2017).

1.9 Calidad del aire de Quito

El Municipio de Quito dispone de la Red Metropolitana de Monitoreo Atmosférico (REMMQ) para el monitoreo del aire de la ciudad. La red de monitoreo compone de seis subsistemas que se encargan de la medición de la concentración de contaminantes, variables meteorológicas y ruido ambiental.

1.9.1 Red automático (RAUTO)

Está compuesto por ocho estaciones fijas con analizadores automáticos de gases y de partículas, estaciones que se localizan en cada una de las administraciones zonales y además cuentan con una estación de respaldo ubicada en Jipijapa. En la figura 2 se puede apreciar la ubicación de las estaciones automáticas, las cuales operan las 24 horas del día.

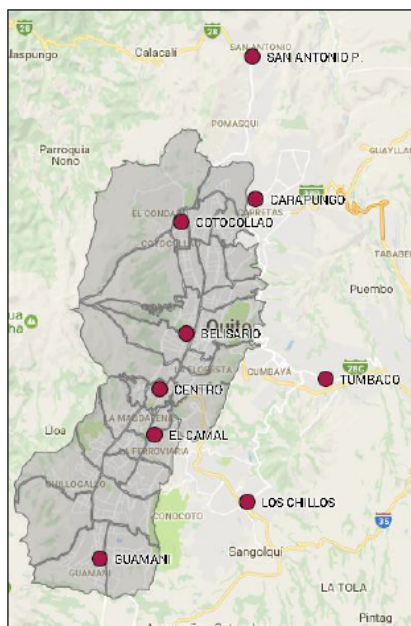


Figura 2. Ubicación de los analizadores automáticos

Fuente: (Secretaria Ambiente, 2017)

1.9.2 Red de monitoreo pasivo (REMPA)

Operan desde el 2005 y permite realizar el muestreo simultáneo en 43 puntos del DMQ, en zonas identificadas por contaminación de fuentes fijas o móviles, nivel de calles, sector rural y blancos regionales, nueve de estos puntos coinciden con las estaciones de la RAUTO con el fin de correlacionar los resultados obtenidos y disminuir la incertidumbre.



Figura 3. Ubicación de los analizadores automáticos

Fuente: (Secretaría Ambiente, 2017)

1.9.3 Red de depósito (REDEP)

La Redep opera desde mayo del 2005 y esta conformada por 37 puntos de monitoreo que registra el sedimento de polvo atmosférico (partículas sedimentables).

1.9.4 Red activa de material particulado (RAPAR)

Opera desde el 2003, comprende cinco muestreadores activos semiautomáticos de alto volumen para partículas menores a 10 μm y menor a 2.5 μm .

1.9.5 Red meteorológica (REMET)

La red meteorológica está conformada por 6 estaciones, con sensores de velocidad y dirección del viento, humedad relativa, radiación solar global, temperatura, presión atmosférica y precipitación. La información generada por las diferentes redes de monitoreo puede ser visualizada en la página web de la secretaría de ambiente (www.quitoambiente.gob.ec), cabe destacar que esta información se actualiza cada 2 horas.

La dirección de las estaciones de monitoreo se encuentran en la tabla 6 y los contaminantes que miden cada una de las estaciones se presentan en la tabla 8.

Tabla 6.*Dirección de estaciones de monitoreo*

| Código | Nombre | Altitud (msnm) | Dirección |
|---------------|---------------|---------------------------|---|
| COT | Cotocollao | 2770 | Museo Cotocollao |
| CAR | Carapungo | 2851 | Edificio Andinatel Carapungo |
| BEL | Belisario | 2835 | Terraza del Edificio Administración Colegio San Gabriel |
| JIP | Jipijapa | 2781 | Patio de la dirección Metropolitana Ambiental |
| CAM | El Camal | 2840 | Terraza del Hos. Patronato Municipal San José del Sur |
| CEM | Centro | 2820 | Terraza del la Radio Municipal |
| GUA | Guamaní | 2887 | Terraza de Andinatel (Gaspar de Carvajal) |
| TUM | Tumbaco | 2331 | Tumbaco |
| LCH | Los Chillos | 2453 | Terraza de Andinatel (Av. Ilalo, vía a El Tingo) |

Fuente: (Secretaría Ambiente, 2017)

Tabla 7.*Contaminantes medidos a través de las fuentes de monitoreo*

| Estación | Nomenclatura | CO | NO2 | O3 | SO2 | PM25 | PM10 |
|-----------------|---------------------|-----------|------------|-----------|------------|-------------|-------------|
| Carapungo | Car | x | x | x | x | x | x |
| Cotocollao | Cot | x | x | x | x | x | |
| Belisario | Bel | x | x | x | x | x | |
| Centro | Cen | x | x | x | x | x | |
| El Camal | Cam | x | x | x | x | x | |
| Guamaní | Gua | x | x | x | | | x |
| Los Chillos | Chi | | x | x | x | | |
| Tumbaco | Tum | | | x | x | | x |

Fuente:(Secretaria Ambiente, 2017)

CAPÍTULO 2

MODELOS DE CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA

En este capítulo se estudian ciertos resultados de la mecánica de fluidos, básicamente los teoremas de Gauss, de Green Gauss, de transporte de Reynolds y finalmente de tratarán la leyes fundamentales que rigen los medios continuos. Existe una extensa bibliografía sobre el tema, pero se ha preferido basarse en: (Albuja y Naula, 2001) (García, 2012) (Romero, Moreno y Rodriguez, 2001)(Oyazún, 2007) (Benalcázar, 1994) (Molina,2013) (Evans, 1998) (Brezis, 1983).

2.1 Resultados Fundamentales del Análisis Vectorial

2.1.1 Definiciones matemáticas importantes

Se define como $\mathbb{R}^2 = \{(x_1, x_2)/x_i \in \mathbb{R}, i = 1, 2\}$, donde $(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ se llama par ordenado; $\mathbb{R}^3 = \{(x_1, x_2, x_3)/x_i \in \mathbb{R}, i = 1, 2, 3\}$, donde $(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ se llama terna ordenada y de manera general,

$\mathbb{R}^n = \{(x_1, x_2, \dots, x_n)/x_i \in \mathbb{R}, \quad \forall i = 1, 2, \dots, n\}$, donde $(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ se llama n-uplas ordenadas de números reales, en la cual definimos dos operaciones entre sus elementos: suma y producto por escalar, que se definen de la siguiente manera, para todo $(x_1, \dots, x_n), (y_1, \dots, y_n) \in \mathbb{R}^n, \alpha \in \mathbb{R}$, se tiene,

$$\text{Suma: } (x_1, \dots, x_n) + (y_1, \dots, y_n) = (x_1 + y_1, \dots, x_n + y_n).$$

$$\text{Producto por un escalar: } \alpha(x_1, \dots, x_n) = (\alpha x_1, \dots, \alpha x_n).$$

Con estas operaciones \mathbb{R}^n tiene una estructura algebraica llamada *espacio vectorial*.

Sean los vectores $\vec{x} = (x_1, \dots, x_n)$, $\vec{y} = (y_1, \dots, y_n)$ elementos de \mathbb{R}^n . El producto escalar que lo notaremos $\vec{x} \cdot \vec{y}$ está dado por

$$\vec{x} \cdot \vec{y} = x_1 y_1, \dots, x_n y_n = \sum_{i=1}^n x_i y_i.$$

La *norma* o longitud del vector \vec{x} que lo denotaremos por $\|\vec{x}\|$ está dado por

$$\|\vec{x}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}.$$

Sean los vectores \vec{x}, \vec{y} de \mathbb{R}^n , el coseno del ángulo que forman los dos vectores está dado por

$$\cos(\theta) = \frac{\vec{x} \cdot \vec{y}}{\|\vec{x}\| \|\vec{y}\|}, \quad \|\vec{x}\| \neq 0, \|\vec{y}\| \neq 0, \quad \text{donde } 0 \leq \theta \leq \pi,$$

se tiene que si $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$ o si $\frac{3\pi}{2} \leq \theta \leq 2\pi$ entonces $\vec{x} \cdot \vec{y} \geq 0$, y si $\frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \frac{3\pi}{2}$ entonces $\vec{x} \cdot \vec{y} \leq 0$.

Dos vectores \vec{x}, \vec{y} de \mathbb{R}^n son ortogonales si su producto escalar es nulo es decir, si $\vec{x} \cdot \vec{y} = 0$ y se denota $x \perp y$.

Sea Ω un subconjunto de \mathbb{R}^n abierto y $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ una función tal que sus derivadas parciales de primer orden existen, entonces, para ello el *gradiente* de f en $\vec{x} = (x_1, \dots, x_n)$ es el vector de \mathbb{R}^n definido por

$$\nabla f(x_1, \dots, x_n) = \nabla f(\vec{x}) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\vec{x}), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(\vec{x}) \right).$$

Sea Ω un subconjunto de \mathbb{R}^n abierto ($n \geq 2$), \vec{F} un campo vectorial diferenciable en $\vec{x} \in \Omega$, existen f_1, f_2, \dots, f_n campos vectoriales diferenciables en \vec{x} tal que $\vec{F} = \sum_{i=1}^n f_i \vec{e}_i$. La *divergencia* de \vec{F} se define como

$$\operatorname{div}(\vec{F}) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_i} = \frac{\partial f_1}{\partial x_1} + \dots + \frac{\partial f_n}{\partial x_n}.$$

Sea Ω un dominio acotado de \mathbb{R}^n y $g : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ un campo escalar que posee segundas derivadas en todo punto de Ω . Si $\vec{F} = \nabla g$, entonces

$$\operatorname{div}(\vec{F}) = \operatorname{div}(\nabla g) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial g}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial g}{\partial x_1} \right) + \dots + \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial g}{\partial x_n} \right).$$

que se denomina *laplaciano de g* y se le nota $\nabla^2 g$, donde ∇ es el *operador de Laplace*, es decir

$$\nabla^2 g = \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 g}{\partial x_i^2} = \frac{\partial^2 g}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2 g}{\partial x_n^2}.$$

otra notación para el laplaciano de g es $\nabla^2 g$. Observe que $\nabla g = \nabla^2 g = \nabla \cdot (\nabla g)$.

2.1.2 Volumen de control

Se considera un volumen de control a una región fija del plano o del espacio a través de la cual circula un fluido. Un volumen de control es un conjunto no vacío de R^3 limitado por una superficie cerrada llamada superficie de control. El volumen de control y la superficie de control pueden ser fijos o móviles. El fluido puede entrar o salir del volumen de control, el volumen de control puede sufrir deformaciones con el tiempo. Generalmente este volumen de control es dependiente del tiempo t . Para ello suponemos que el volumen

de control se desplaza con la mismas velocidad del flujo y que la velocidad en todo punto de la superficie del volumen de control es igual a la velocidad del fluido.

Posteriormente se obtendrá las ecuaciones diferenciales de flujo de un fluido aplicando las leyes fundamentales utilizando volúmenes de control que se asumira son conjuntos medibles en el sentido de Lebesgue, este trabajo estará limitado a conjunto acotados y medibles en R^2 .

2.1.3 Teorema de la divergencia de Gauss

Sea Ω un dominio acotado de \mathbb{R}^2 con Γ su frontera, $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ y $\vec{F} : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^2$ un campo vectorial tal que $\text{div}(\vec{F})$ integrable en Ω y $\vec{F} \cdot \vec{n}$ integrable sobre Γ . Entonces se tiene

$$\int_{\Omega} \text{div}(\vec{F}) dx = \int_{\Gamma} \vec{F} \cdot \vec{n} ds, \quad (2.1)$$

donde $\vec{F} = (f_1, f_2)$, $\text{div}(\vec{F}) = \frac{\partial f_1}{\partial x_1} + \frac{\partial f_2}{\partial x_2}$ y \vec{n} es el vector normal exterior a Γ . Nótese que la integral del lado izquierdo (ecuación 2.1) es una integral doble y la integral del lado derecho es una integral de línea con respecto a la longitud de arco a lo largo de la curva Γ .

Sea $x_0 \in \Gamma$ y $\vec{n}(x_0)$ el vector normal exterior a Γ en x_0 . Sea $\theta \in [0, \pi]$ el ángulo que forman $\vec{F}(x_0)$ y $\vec{n}(x_0)$, entonces $\vec{F}(x_0) \cdot \vec{n}(x_0) \geq 0$ si $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$, cuyo caso $\vec{F}(x_0)$ está dirigido hacia el exterior de Ω y significa que existe salida de flujo a través de la frontera Γ ; $\vec{F}(x_0) \cdot \vec{n}(x_0) < 0$ si $\theta \in [\frac{\pi}{2}, \pi]$, en este caso $\vec{F}(x_0)$ está dirigido hacia el interior de Ω y significa que ingresa flujo a través de la frontera Γ .

La integral de línea $\int_{\Gamma} \vec{F} \cdot \vec{n} ds$ representa la circulación de \vec{F} a lo largo de Γ . consecuentemente $\int_{\Omega} \text{div}(\vec{F}) dx$ representa la circulación de \vec{F} a lo largo de Γ .

Si $\vec{F} = \nabla g$, y se reemplaza en la ecuación 2.1, se tiene

$$\int_{\Omega} \text{div}(\vec{F}) dx = \int_{\Omega} \text{div}(\nabla g) dx = \int_{\Omega} \Delta g dx, \quad (2.2)$$

luego,

$$\int_{\Omega} \Delta g dx = \int_{\Gamma} \nabla g \cdot \vec{n} ds. \quad (2.3)$$

El término $\nabla g \cdot \vec{n}$ se llama derivada normal de g con respecto a la normal en Γ y se denota con $\frac{\partial g}{\partial n}$, es decir,

$$\frac{\partial g}{\partial n} = \nabla g \cdot \vec{n}. \quad (2.4)$$

2.1.4 Teorema fundamental del cálculo de variaciones

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, abierto y acotado, $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ una función integrable en Ω si

$$\int_V f(x) dx = 0,$$

para todo subconjunto medible $V \subset \Omega$, entonces.

$$f = 0, \quad \text{ctp de } \Omega.$$

El término ctp de Ω , quiere decir casi en todo de Ω , que a su vez significa $f = 0$ excepto en un conjunto de medida de Lebesgue nula.

2.1.5 Teorema de Green-Gauss

Sea Ω un dominio acotado en \mathbb{R}^2 con Γ su frontera, $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ y $\varphi : \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$, un campo escalar, $\vec{F} = \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^2$ un campo vectorial con $\vec{F} = (f, g)$, supongamos que $\frac{\partial \varphi}{\partial x} f, \frac{\partial \varphi}{\partial y} g$ son integrables en Ω , entonces se tiene

$$\int_{\Omega} \varphi \operatorname{div}(\vec{F}) dx + \int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot \vec{F} dx = \int_{\Gamma} \varphi \vec{F} \cdot \vec{n} ds. \quad (2.5)$$

Si $\vec{F} = \nabla u$, por el teorema de Green- Gauss, se tiene

$$\int_{\Omega} \varphi \Delta u dx + \int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot \nabla u dx = \int_{\Gamma} \varphi \nabla u \cdot \vec{n} ds,$$

o también

$$\int_{\Omega} \varphi \Delta u dx + \int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot \nabla u dx = \int_{\Gamma} \varphi \frac{\partial u}{\partial n} ds. \quad (2.6)$$

2.1.6 Teorema de transporte de Reynolds

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ un dominio acotado en \mathbb{R}^2 con Γ su frontera de clase C^1 a trozos, sean $T_1, T_2 \in \mathbb{R}$ tales que $0 \leq T_1 \leq T_2$, y

$$f : \begin{cases} \bar{\Omega} \times [T_1, T_2] \rightarrow \mathbb{R}, \\ (x, t) \rightarrow f(x, t), \end{cases}$$

una función tal que para todo punto $t \in [T_1, T_2]$, $f(\cdot, t), \frac{\partial f}{\partial t}$ son integrables en $\bar{\Omega}$. Para $t \in [T_1, T_2]$, sea $\Omega(t) \subset \bar{\Omega}$ un volumen de control y $\Gamma(t)$ su frontera. Entonces

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} f(x, t) dx = \int_{\Omega(t)} \frac{\partial f}{\partial t}(x, t) dx + \int_{\Gamma(t)} f(x, t) \vec{v} \cdot \vec{n} ds, \quad (2.7)$$

donde \vec{v} es la velocidad local de $\Omega(t)$ y \vec{n} es el vector normal exterior a $\Gamma(t)$. Se supone que la integral de línea existe.

El teorema de transporte de Reynolds tiene la siguiente interpretación física: la rapidez de cambio de flujo en el volumen de control es igual a la rapidez de flujo que entra al volumen de control más el flujo en la frontera. Si $f(x, t) \vec{v} \cdot \vec{n} > 0$ existe salida de flujo en la frontera, si $f(x, t) \vec{v} \cdot \vec{n} = 0$ no existe entrada ni salida de flujo y si $f(x, t) \vec{v} \cdot \vec{n} < 0$ ingresa flujo a través de la frontera (Albuja y Naula, 2001), es decir, el balance de f del sistema $\Omega(t)$ es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Tasa de variación} \\ \text{de la integral de } f \\ \text{sobre el volumen} \\ \text{de control } \Omega(t) \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Integral sobre } \Omega(t) \\ \text{de la variación de} \\ f \text{ con respecto al} \\ \text{tiempo} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo de } f \text{ a} \\ \text{través de la} \\ \text{frontera } \Gamma(t) \end{array} \right\}$$

Por el teorema de la divergencia de Gauss, se tiene

$$\int_{\Gamma(t)} f(x, t) \vec{v} \cdot \vec{n} ds = \int_{\Omega(t)} \text{div}(f \vec{v}) dx. \quad (2.8)$$

Remplazando en la ecuación 2.5, resulta

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} f(x, t) dx &= \int_{\Omega(t)} \frac{\partial f}{\partial t}(x, t) dx + \int_{\Omega(t)} \text{div}(f \vec{v}) dx \\ &= \int_{\Omega(t)} \left[\frac{\partial f}{\partial t} + \text{div}(f \vec{v}) \right] dx. \end{aligned} \quad (2.9)$$

2.1.7 Ecuación de continuidad

Sea $\Omega(t)$ un volumen de control que se mueve con una velocidad v , $t \in [T_1, T_2]$, por lo que la densidad de la concentración de la sustancia contaminante contenido en $\Omega(t)$ es $c(x, t) = \frac{dm(t)}{dV}$, de donde $dm(t) = c(x, t)dV$ e integrando sobre $\Omega(t)$, se tiene:

$$m(t) = \int_{\Omega(t)} dm(t) = \int_{\Omega(t)} c(x, t)dx, \quad \forall x \in \Omega(t) \subset \Omega. \quad (2.10)$$

Derivando la masa respecto al tiempo se tiene

$$\frac{dm(t)}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} c(x, t)dx, \quad (2.11)$$

y por el teorema de transporte de Reynolds, resulta

$$\frac{dm(t)}{dt} = \int_{\Omega(t)} \left[\frac{dc}{dt} + \text{div}(c\vec{v}) \right] dx. \quad (2.12)$$

Este es un sistema conservativo, por lo que la masa no se crea, ni se destruye; es decir que la masa permanece constante durante todo el proceso, esto es $\frac{dm(t)}{dt} = 0$ para todo $t \geq 0$, es decir,

$$\int_{\Omega(t)} \left[\frac{dc}{dt} + \text{div}(c\vec{v}) \right] dx = 0. \quad (2.13)$$

La integral precedente es válida para cualquier volumen de control, se demuestra que

$$\frac{dc}{dt} + \text{div}(c\vec{v}) = 0 \quad \text{ctp de } \Omega \times]T_1, T_2[. \quad (2.14)$$

La ecuación precedente se denomina “*ecuación de continuidad*” para sistemas conservativos. En lo sucesivo se escribirá

$$\frac{dc}{dt} + \text{div}(c\vec{v}) = 0 \quad \text{sobre } \Omega_T, \quad (2.15)$$

donde $\Omega_T = \Omega \times]T_1, T_2[$.

El flujo del contaminante se define como la cantidad de masa que atraviesa una superficie de área A en un tiempo t . Sea $\Omega(t)$ un volumen de control por el que circula un contaminante de abajo hacia arriba con una velocidad $\vec{v}(t)$. El área de la superficie de

la base es A y la altura del volumen de control es L , entonces, la magnitud de flujo se expresa como:

$$J = \frac{m}{At} \quad \left(\text{en } \frac{kg}{m^2s} \text{ o } \frac{g}{cm^2s} \right),$$

Multiplicando por L tanto al numerador como al denominador, se obtiene

$$J = \frac{mL}{ALt},$$

y tomando en cuenta que el volumen de $\Omega(t)$ es $V = AL$, la velocidad $v(t) = \frac{L}{t}$ y la densidad $c = \frac{m}{V}$, se tendrá que $J = \frac{m}{V} \cdot v(t) = c v(t)$.

El flujo se define como el campo vectorial

$$\vec{J}(x, y) = c(x, y) \vec{v}(t),$$

cuya magnitud en el instante t es

$$J = c v(t).$$

Nótese que el flujo \vec{J} y su magnitud J son valores medios en el volumen de control $\Omega(t)$.

Ahora la ecuación de continuidad se expresa como

$$\frac{dc}{dt} + \text{div}(\vec{J}) = 0 \quad \text{sobre } \Omega \times]T_1, T_2[. \quad (2.16)$$

2.2 Transporte por difusión

Cuando en un sistema hay un gradiente de concentraciones. Podemos decir que la difusión es la dispersión de las sustancias presentes en un espacio debido al movimiento aleatorio de sus moléculas, desde zonas de mayor concentración a zonas de menor concentración, la distribución espacial de las moléculas no debe ser homogénea, es decir debe existir una diferencia o gradiente de concentración entre dos puntos del medio. Por medio de este proceso las sustancias tienden a difundirse en el espacio hasta lograr el equilibrio de la concentración presente en el mismo (Both, 1978).

El proceso de transporte de contaminantes por difusión, solo depende de la temperatura, la viscosidad y el tamaño de las moléculas de las sustancias, el proceso de difusión se presenta aun cuando no exista una diferencia de concentración de los contaminantes en el espacio y se representa matemáticamente por medio de la primera ley de Fick.

2.2.1 Primera ley de Fick.

La rapidez de difusión o flujo difusivo por unidad de área de sección transversal en una dirección determinada es directamente proporcional al cambio de la concentración de las moléculas de las sustancias en esa dirección. La ecuación para esta ley es:

$$J_d = -D \frac{\partial c}{\partial x}, \quad (2.17)$$

donde J es la tasa de transporte de sustancia por difusión, siendo su unidad de denominación $\frac{Kg}{m^2.s}$ o $\frac{mol}{m^2.s}$, dimensionalmente $[M/L^2T]$, D es el coeficiente de difusión, que depende de las sustancias y la temperatura, representa la facilidad en que una sustancia puede dispersarse en un fluido, siendo su unidad de denominación m^2/s , dimensionalmente $[L^2/T]$, $\frac{\partial c}{\partial x}$ gradiente de concentración de la sustancia difusiva, el signo menos presente en la ecuación indica que el flujo va de las zonas de mayor a las de menor concentración y x distancia sobre la cual se consideran cambios en la concentración, su unidad es m y su dimensión es $[L]$.

La primera ley de Fick puede también expresarse en 3 dimensiones usando notación vectorial en la forma

$$J = -D \nabla c,$$

donde ∇ es el operador de gradiente, ∇J conforma el término difusivo de transporte de contaminantes, D coeficiente de difusión, es similar en todas las direcciones y c concentración del contaminante.

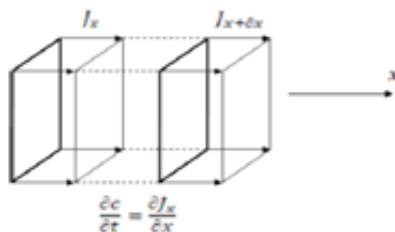


Figura 4. Transporte difusivo

Se puede decir que el gradiente de concentración es el “motor de la difusión”: a mayor gradiente (mayor diferencia de concentración de las dos sustancias) mayor difusión, si

la concentración varía también en las otras direcciones, hay un flujo en cada dirección. Existe un proceso de difusión siempre que se establezca una gradiente de concentración.

2.2.2 Segunda ley de Fick

La difusión de contaminantes en el aire en un estado no estacionario, es decir la difusión de los contaminantes no constante por lo que el flujo de difusión y el gradiente de concentración varían en el tiempo, generando acumulación o agotamiento de las sustancias difusas, este proceso se describe mediante la segunda ley de Fick.

Remplazando la primera ley de Fick en la ecuación de continuidad, se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}(-D\nabla c) &= 0, \\ \frac{\partial c}{\partial t} - D \text{div}(\nabla c) &= 0, \end{aligned}$$

y como $\text{div}(\nabla c) = \Delta c$ (laplaciano de c). Luego,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c}{\partial t} - D\Delta c = 0, \\ + \text{Condiciones iniciales}, \\ + \text{Condiciones de contorno}. \end{array} \right.$$

Expresando en términos de una sola dimensión:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D \frac{\partial c}{\partial x} \right) = 0.$$

Debido a que el coeficiente de difusividad (D) es constante, se obtiene

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = 0.$$

Finalmente la segunda ley de Fick queda definida como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}. \quad (2.18)$$

2.3 Transporte por advección.

La advección es el proceso de transporte de las sustancias debido al movimiento de los fluidos causado por la variación de las propiedades como son la presión y la temperatura ya sea en el aire o agua. El movimiento advectivo queda definido matemáticamente por la dirección y magnitud de su velocidad, dado que a pesar de la ocurrencia de dispersión,

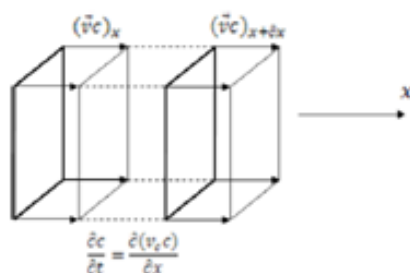


Figura 5. Transporte advectivo

el centro de masa del elemento químico que es transportado por advección, se mueve a la velocidad promedio del flujo, siempre y cuando no se produzca adsorción y retardo.

La tasa a la cual un elemento químico es transportado por unidad de área (perpendicular a la dirección del movimiento) se expresa en términos de la densidad de flujo de acuerdo a la siguiente expresión.

$$J_a = c \cdot v ,$$

donde J densidad del flujo, siendo sus unidades de denominación $Kg/m^2 \cdot s$, o, $mol/m^2 \cdot s$, dimensionalmente $[M/L^2T]$, c concentración del químico, siendo sus unidades kg/m^3 , dimensionalmente $[M/L^3]$ y v es la velocidad del viento, siendo sus unidades m/s , dimensionalmente $[L/T]$.

2.4 Ecuación de transporte

Remplazando la ecuación de transporte advectivo $J_a = cv$, en la ecuación de la continuidad se obtiene.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}(cv) = 0 .$$

Considerando a la velocidad constante, finalmente se obtiene:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \nabla c = 0 . \quad (2.19)$$

2.5 Ecuación de advección – difusión

El flujo del transporte de masa es igual a la suma del flujo de transporte difusivo (J_d) y el flujo de transporte advectivo (J_a), por lo tanto:

$$\vec{J} = -D \nabla c + c \vec{v}$$

Remplazando en la ecuación de continuidad se obtiene:

$$\begin{aligned}\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(-D\nabla c + c\vec{v}) &= 0, \\ \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div}(D\nabla c) + \operatorname{div}(c\vec{v}) &= 0.\end{aligned}$$

Cuando \vec{v} es constante se obtiene

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D\Delta c + \vec{v} \cdot \nabla c = 0. \quad (2.20)$$

2.6 Elemento reactivo

El elemento reactivo corresponde a la capacidad del contaminante principal de reaccionar con los elementos presentes en la atmósfera, lo que da a lugar a contaminantes secundarios. Las reacciones son principalmente de tipo químico y fotoquímico, describir las es muy complejo, el presente estudio se limita al análisis a los fenómenos de transporte.

2.7 Ecuación de convección –difusión-reacción

En general si consideramos el dominio $\Omega \in R^n$ con $n = 2$ o 3 y su frontera $\partial\Omega$, los problemas de convección-difusión-reacción pueden ser modelados mediante la ecuación.

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div}(D\nabla c) + \vec{v} \cdot \nabla c + qc = 0 \text{ en } \Omega \times]0, T[. \quad (2.21)$$

2.8 Condiciones iniciales

Como todo problema evolutivo, se debe definir el estado inicial de la variable, en este caso la concentración del contaminante, lo que supone la condición inicial. Los cálculos de la concentración del contaminante a lo largo del tiempo tomarán como punto de partida dicha condición inicial, que se puede formular:

$$c(x, y, 0) = h(x, y), \quad (x, y) \in \Omega.$$

2.9 Condiciones de frontera.

En los problemas parabólicos hay tres tipos principales de condiciones de frontera para describir lo que sucede en la frontera del dominio físico en el que se produce el transporte de partículas: condiciones de Dirichlet, condiciones de Neumann y las condiciones mixtas o Robin.

Aque deben ser definidos los comportamientos de la concentración sobre la frontera, a lo largo de toda la duración del estudio T.

2.9.1 Condición de Dirichlet

En la condición de frontera de Dirichlet o de primer tipo, se especifican los valores de la solución en la frontera del dominio Ω .

En el problema, $c(x, y, t) = g(x, y, t)$ en $\partial\Omega \times [0, T]$ se denomina condición de Dirichlet, donde $g(x, y, t)$ va a representar la concentración del contaminante en T_1 al instante t , dependiendo de las características del problema.

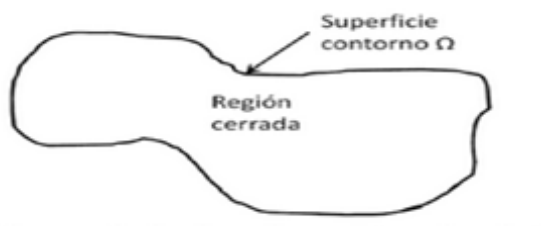


Figura 6. Condición de frontera de Dirichlet

2.9.2 Condición de Neumann

En la condición de frontera de Neumann o de segundo tipo, se especifican los valores de la derivada de una solución tomada sobre el contorno del dominio Ω .

En primer lugar, la derivada normal en la frontera Γ , se denota por $\frac{\partial c}{\partial n}$ y se define como $\frac{\partial c}{\partial n} = \nabla c \cdot \vec{n}$, siendo \vec{n} el vector unitario normal exterior a Γ . Note que $\nabla c \cdot \vec{n} \leq 0$ flujo entrante, $\nabla c \cdot \vec{n} \geq 0$ flujo saliente de Ω .

2.9.3 Condición de Rubín

Corresponden a la combinación de las condiciones de Dirichlet y condiciones de Neumann en la frontera Γ .

CAPÍTULO 3

ESPACIOS FUNCIONALES IMPORTANTES

En este capítulo se va a tratar los resultados fundamentales de los espacios funcionales importantes tales como las funciones test, el espacio de las distribuciones y las formas bilineales continuas, los espacios de Hilbert, los espacios Sobolev y el lema de Lax-Milgran. Temas que servirán para estudiar los resultados de existencia y unicidad para problemas de contorno para ecuaciones en derivadas parciales elípticas de segundo de orden. Los resultados que se dan a continuación se encuentran en (Albuja y Naula, 2001) (García, 2012) (Gómez, 2006) (Marinovich, 2012) (Benalcázar, 1994) (Evans, 1998) (Brezis, 1983). y son habituales en aplicaciones a ecuaciones en derivadas parciales.

3.1 Espacios normados

Definición.- Sea V un espacio vectorial sobre \mathbb{R} . Una norma en V , que se denota por $\| \cdot \|$, es una función de V en \mathbb{R} que cumple las siguientes propiedades:

- $\| x \| \geq 0; \quad \forall x \in V.$
- $\| x \| = 0 \iff x = 0.$
- $\| \lambda x \| = |\lambda| \| x \|, \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}, \quad x \in V.$
- $\| x + y \| \leq \| x \| + \| y \|, \quad \forall x, y \in V$ (*desigualdad triangular*).

El par $(V, \| \cdot \|)$ se denomina *espacio normado*, en lo sucesivo se dirá que V es un espacio normado, con norma $\| \cdot \|$ definida en V .

Definición.- Sean $I \subset \mathbb{N}$, con $I \neq \emptyset$ y un espacio normado V . Toda función de I en V se denomina sucesión en V .

A $u(n)$ con $n \in I$ que lo denotaremos u_n y lo denominaremos término general de la sucesión. A la sucesión lo denotaremos con (u_n) .

Definición.- Sea (u_n) una sucesión en un espacio normado V . Se dice que (u_n) es convergente en V si existe $u \in V$ tal que $\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = u$, es decir que, u verifica la condición siguiente:

$$\forall \varepsilon > 0, \exists \eta_0 \in \mathbb{N} \text{ tal que } \forall n \geq \eta_0 \Rightarrow \|u_n - u\| < \varepsilon. \quad (3.1)$$

Definición.- Una sucesión (u_n) en un espacio normado V , se dice sucesión de Cauchy si verifica la siguiente condición:

$$\forall \varepsilon > 0, \exists \eta_0 \in \mathbb{N} \text{ tal que } \forall m, n \geq \eta_0 \Rightarrow \|u_m - u_n\| < \varepsilon. \quad (3.2)$$

Toda sucesión convergente (u_n) en un espacio normado V es una sucesión de Cauchy, el recíproco, en general, no es cierto.

Definición.- Un espacio normado V se dice que es completo si toda sucesión de Cauchy en V es convergente. Un espacio de *Banach* es un espacio normado completo, en el que toda sucesión de Cauchy es convergente.

3.2 Espacios de Hilbert

Definición.- Sea V un espacio vectorial sobre \mathbb{R} , un producto escalar en V , que lo denotaremos con $\langle \cdot, \cdot \rangle$, es una función de $V \times V$ en \mathbb{R} que se denota con $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ tal que cumple con las siguientes propiedades:

- $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle, \quad \forall x, y \in V.$
- $\langle \alpha x + \beta y, z \rangle = \alpha \langle x, z \rangle + \beta \langle y, z \rangle, \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}, \quad \forall x, y \in V.$
- $\langle \alpha x, y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle, \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}, \quad \forall x, y \in V.$
- $\langle x, x \rangle \geq 0, \quad \forall x \in V.$
- $\langle x, x \rangle = 0 \iff x = 0.$

Se dice que un espacio vectorial V provisto de un producto escalar $\langle \cdot, \cdot \rangle$ de V se llama *espacio euclídeo*.

Todo espacio euclídeo V puede ser normado si se le provee de la norma siguiente :

$$\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}, \quad \forall x \in V.$$

Esta norma de $\|x\|$ de V en \mathbb{R} definida por $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$, se dice inducida por el producto escalar $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Resulta así que V es un espacio normado, V se dice inducido por el producto escalar.

En un espacio euclídeo V se verifica la siguiente desigualdad

$$|\langle x, y \rangle| \leq \|x\| \|y\|, \quad \forall x, y \in V,$$

A esta desigualdad se la conoce como *desigualdad de Cauchy-Schwarz*.

Definición.- Un *espacio de Hilbert* V es un espacio euclídeo que como espacio normado es completo.

Definición.- Sea V un espacio euclídeo. Sean $x, y \in V$. Se dice que x es ortogonal a y si $\langle x, y \rangle = 0$, que se escribe $x \perp y$.

Definición.- Sea V un espacio normado, $x \in V$ y $K \subset V$. La *distancia de x a K* , se define como $d(x, K) = \inf_{v \in K} \|x - v\|$.

Definición.- Un espacio de Hilbert V es un espacio normado inducido por el producto escalar que es espacio de Banach para la norma $\langle x, x \rangle^{1/2}$. Esto es, toda sucesión de Cauchy en V con respecto a la norma inducida por el producto escalar $\langle \cdot, \cdot \rangle$, es convergente en V (Benalcázar, 1994)

3.3 Aplicaciones lineales continuas

Definición.- Sean V, W espacios vectoriales reales, normados con $\|\cdot\|_V, \|\cdot\|_W$ sus normas respectivamente.

1.- Una aplicación T de V en W se dice *lineal* si verifica la siguiente condición:

$$T(\alpha x + \beta y) = \alpha T(x) + \beta T(y) \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}, \quad \forall x, y \in V.$$

2.- Sea $T : V \rightarrow W$ una aplicación lineal. El conjunto $\ker(T) = \{x \in V : T(x) = 0\}$ se llama *núcleo* de T , el conjunto $R(T) = \{T(x) : x \in V\}$ se llama *recorrido* de T .

3.- Sea $T : V \rightarrow W$ una aplicación lineal. La aplicación T se dice *continua* si

$$\forall \epsilon > 0, \exists \delta > 0 \text{ tal que } \|x - y\|_V < \delta \implies \|T(x) - T(y)\|_W < \epsilon.$$

El conjunto $\ker(T)$ es un subespacio de V , $R(T)$ es un subespacio de W . Además, si V y W son de dimensión finita, las dimensiones de $\ker(T)$ y de $R(T)$ están relacionadas del modo siguiente:

$$\dim \ker(T) + \dim R(T) = \dim V.$$

Una aplicación lineal T de V en W es *inyectiva* si $\ker(T) = \{0\}$ y es *sobreyectiva* si $R(T) = W$. La aplicación lineal T se dice *invertible* si T es *biyectiva*, esto es, T es inyectiva y sobreyectiva.

Se demuestra que las siguientes proposiciones son equivalentes:

- a. T es continua.
- b. T es continua en el origen.
- c. T es acotada en la bola unitaria centrada $\overline{B(0, 1)}$.
- d. Existe una constante $C > 0$ tal que $\|T(x)\|_W \leq C \|x\|_V$, $\forall x \in V$.

Por otra parte se puede probar que una aplicación lineal T de V en W es continua, si y solo si, para toda sucesión $(x_n) \subset V$ convergente a $x \in V$, la sucesión $(T(x_n))$ es convergente a $T(x) \in W$.

Se denota con $\mathcal{L}(V, W)$ al espacio de todas las aplicaciones lineales continuas de V en W . En tal espacio introducimos la norma

$$\|T\|_{\mathcal{L}(V, W)} = \sup_{\|x\|_V \leq 1} \|T(x)\|_W, \quad \forall T \in \mathcal{L}(V, W),$$

con lo cual $\mathcal{L}(V, W)$ es un espacio normado. Si $V = W$, notamos $\mathcal{L}(V)$ en lugar de $\mathcal{L}(V, W)$. Por otro lado se prueba que si W es un espacio Banach entonces $\mathcal{L}(V, W)$ es un espacio de Banach. En particular si $W = \mathbb{R}$, el espacio $\mathcal{L}(V, \mathbb{R})$ se denota con V^* y se denomina *espacio dual topológico* de V . Los elementos de V^* se llaman formas lineales continuas. La norma V^* está definida por

$$\|T\|_{V^*} = \sup_{\|x\|_V \leq 1} |T(x)| = \sup_{x \in V, x \neq 0} \frac{|T(x)|}{\|x\|_V}, \quad \forall T \in V^*.$$

Teorema (representación de Riesz).- Sea V un espacio real de Hilbert y V^* su dual. Para cada $L \in V^*$ existe un único $u \in V$ tal que

$$L(v) = (u, v), \quad \forall v \in V.$$

$$\|L\|_{V^*} = \|u\|_V.$$

Además, existe $\gamma \in \mathcal{L}(V^*, V)$ tal que

$$\gamma(L) = u$$

y

$$\|\gamma(L)\|_V = \|L\|_{V^*}.$$

3.4 Formas bilineales continuas

Definición.- Sean V, W espacios vectoriales reales. Una aplicación $a(\cdot, \cdot)$ de $V \times W$ en \mathbb{R} se denomina *forma bilineal* en $V \times W$ si cumple con las siguientes condiciones:

- $a(\alpha x + \beta y, z) = \alpha a(x, z) + \beta a(y, z), \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}, \quad \forall x, y \in V, \quad \forall z \in W.$
- $a(x, \alpha y + \beta z) = \alpha a(x, y) + \beta a(x, z), \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}, \quad \forall x \in V, \quad \forall y, z \in W.$

Definición.- Se dice que la forma bilineal $a(\cdot, \cdot)$ es *simétrica* si $a(\cdot, \cdot)$ es una forma bilineal en V si cumple con:

$$a(x, y) = a(y, x), \quad \forall (x, y) \in V.$$

Definición.- Sean V, W dos espacios vectoriales reales y $a(\cdot, \cdot)$ una forma bilineal en $V \times W$. Se dice que $a(\cdot, \cdot)$ es *continua* si existe una constante $M > 0$ tal que

$$a(x, y) \leq M \|x\|_V \|y\|_W, \quad \forall (x, y) \in V \times W.$$

Definición.- Sea V un espacio de Hilbert real y $a(\cdot, \cdot)$ una forma bilineal en V . Se dice que $a(\cdot, \cdot)$ es *coerciva* si existe una constante $\alpha > 0$ tal que

$$a(x, x) \geq \alpha \|x\|_V^2, \quad \forall x \in V.$$

Sea V un espacio de Hilbert real y $a(\cdot, \cdot)$ una forma bilineal en V , utilizando el teorema de representación de Riesz, se prueba que existe $T \in \mathcal{L}(V)$ tal que

$$a(x, y) = (x, T(y))_V, \quad \forall x, y \in V.$$

Teorema (Stampacchia).- Sea V un espacio de Hilbert y $a(u, v)$ una forma bilineal, continua y coerciva en V , $K \subset V$, $K \neq \emptyset$ un convexo cerrado y $f \in V$. Entonces existe un único $u \in K$ tal que

$$a(u, v - u) \geq (f, v - u)_V, \quad \forall v \in K.$$

Además si a es simétrica, entonces $u \in K$ se caracteriza por la propiedad

$$\left\{ \begin{array}{l} u \in K, \\ \frac{1}{2}a(u, u) - \langle f - u \rangle = \text{Min}_{v \in K} \left\{ \frac{1}{2}a(v, v) - \langle f, v \rangle \right\}. \end{array} \right.$$

3.4.1 Lema de Lax-Milgran

Sea V un espacio de Hilbert y $a(\cdot, \cdot)$ una forma bilineal, continua y coerciva en V . Entonces para todo $f \in V^*$ existe un único $u \in V$ tal que

$$a(u, v) = \langle f, v \rangle, \quad \forall v \in V.$$

Ademas si a es simétrica, entonces u se caracteriza por la propiedad.

$$u \in K \text{ y } \frac{1}{2}(u, u) - \langle f, u \rangle = \text{Min}_{v \in V} \left\{ \frac{1}{2}a(v, v) - \langle f, v \rangle \right\}.$$

3.5 Espacios $L^p(\Omega)$

Definición.- Sea Ω un conjunto abierto, acotado en \mathbb{R}^2 y $1 \leq p < \infty$. El espacio $L^p(\Omega)$ se define como el conjunto de clases de funciones cuyo valor absoluto es p integrable sobre Ω , es decir:

$$f \in L^p(\Omega) \Leftrightarrow \begin{cases} f \text{ medible, y,} \\ \int_{\Omega} |f|^p < \infty. \end{cases}$$

La norma definida en este espacio es

$$\|f\|_{L^p(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |f|^p dx \right)^{1/p}.$$

Cuando $p = \infty$ se define como

$$L^\infty(\Omega) = \left\{ : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid f \text{ medible y } \sup_{x \in \Omega} \text{ess} |f(x)| < \infty \right\},$$

con norma

$$\|f\|_{L^\infty(\Omega)} = \sup_{x \in \Omega} \text{ess} |f(x)|.$$

Teorema.- Sea Ω un abierto de \mathbb{R}^2 , $1 \leq p \leq \infty$.

1. Desigualdad de Hölder

Sea $f \in L^p(\Omega)$, $g \in L^q(\Omega)$ con $p, q \in [1, \infty]$ tales que $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ (si $p = 1$, $q = \infty$), entonces $f \cdot g \in L^1(\Omega)$, y,

$$\|f \cdot g\|_{L^1(\Omega)} \leq \|f\|_{L^p(\Omega)} \|g\|_{L^q(\Omega)}.$$

Particularmente, si $p = 2$, $q = 2$. La desigualdad de Hölder no es sino la desigualdad de Cauchy - Schwarz

$$\|f \cdot g\|_{L^1(\Omega)} \leq \|f\|_{L^2(\Omega)} \|g\|_{L^2(\Omega)}.$$

2. Desigualdad triangular (Minkowski)

Sean $f, g \in L^p(\Omega)$ entonces

$$\|f + g\|_{L^p(\Omega)} \leq \|f\|_{L^p(\Omega)} + \|g\|_{L^p(\Omega)}.$$

3. La aplicación $\|\cdot\|_{L^p(\Omega)}$ de $L^p(\Omega)$ en \mathbb{R}^+ es una norma sobre $L^p(\Omega)$.

$L^p(\Omega)$ provisto de dicha norma es un espacio de Banach.

Particularmente para $p = 2$, $L^2(\Omega)$ es un espacio de Hilbert, donde su producto escalar está definido por

$$\langle f, g \rangle_{L^2(\Omega)} = \int_{\Omega} f(x)g(x) dx, \quad \forall f, g \in L^2(\Omega),$$

y su norma asociada por

$$\|f\|_{L^2(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |f(x)|^2 dx \right)^{1/2}.$$

3.5.1 Reflexividad. Separabilidad. Dual de L^p

Los resultados que se enuncian a continuación son los principales en cuanto a reflexividad, separabilidad y dualidad de los espacios $L^p(\Omega)$

Sea Ω un abierto de \mathbb{R}^2 y $p, q \in [0, \infty]$ tal que $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$

i) Para $1 < p < \infty$, $L^p(\Omega)$ es reflexivo, separable y el dual de $L^p(\Omega)$ se identifica a $L^q(\Omega)$ esto es $(L^p(\Omega))^* = L^q(\Omega)$.

ii) Para $p = 1$, $L^1(\Omega)$ es separable, por lo tanto $L^p(\Omega)$ es separable para $1 \leq p < \infty$. El dual de $L^1(\Omega)$ se identifica a $L^\infty(\Omega)$ es decir $(L^1(\Omega))^* = L^\infty(\Omega)$.

El espacio $L^1(\Omega)$ no es reflexivo.

iii) Para $p = \infty$, se tiene que $L^\infty(\Omega)$ no es reflexivo, caso contrario $L^1(\Omega)$ lo sería. El dual de $L^\infty(\Omega)$ contiene a $L^1(\Omega)$ (ya que $(L^1(\Omega))^* = L^\infty(\Omega)$) y es estrictamente mayor que $L^1(\Omega)$, esto es $L^1(\Omega) \subset (L^\infty(\Omega))^*$.

El espacio $L^\infty(\Omega)$ no es separable

3.5.2 Nociones de convergencia en $L^p(\Omega)$

i) Convergencia fuerte (en norma)

Sea $1 \leq p \leq \infty$. Una sucesión (f_n) de $L^p(\Omega)$ converge fuertemente hacia $f \in L^p(\Omega)$ si

$$\|f_n - f\|_{L^p(\Omega)} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

ii) Convergencia débil

Sea $1 \leq p \leq \infty$. Una sucesión (f_n) de $L^p(\Omega)$ converge débilmente hacia $f \in L^p(\Omega)$ si

$$\int_{\Omega} f_n(x)\varphi(x) dx \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} f(x)\varphi(x) dx, \quad \forall \varphi \in L^q(\Omega),$$

donde $q \in [1, \infty]$ tal que $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$.

3.6 Espacio de distribuciones

3.6.1 Funciones test

Definición. Sea Ω un conjunto abierto de \mathbb{R}^2 y sea $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ una función continua. Se llama soporte de φ que se denota por $\text{sop}(\varphi)$, al conjunto definido por:

$$\text{sop}(\varphi) := \text{clausura} \{x \in \Omega \mid \varphi(x) \neq 0\},$$

es decir, como el conjunto de los puntos donde φ no se anula, unido a la frontera del mismo.

El conjunto $D(\Omega)$ es el conjunto de funciones $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ que cumplen las dos condiciones siguientes:

$$\varphi \in C^\infty(\Omega).$$

$\text{sop}(\varphi)$ es compacto (cerrado y acotado) y está estrictamente contenido en Ω .

De las condiciones anteriores, la primera exige que la función φ y todas sus derivadas parciales de cualquier orden sean funciones continuas. Mientras que la segunda, que la función sea no nula sólo en un conjunto acotado, que no puede aproximarse a la frontera de Ω .

Luego notamos $C_0(\Omega)$ el espacio de funciones continuas en Ω de soporte compacto contenido en Ω . Se designa con $C^m(\Omega)$ el espacio de funciones reales $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, que poseen derivadas continuas en Ω hasta el orden m , particularmente si $m = 0$ se tiene $C^0(\Omega)$ que es el espacio de funciones reales continuas en Ω . $C^0(\overline{\Omega})$ es un espacio de Banach con la siguiente norma:

$$\|f\|_{C^0(\overline{\Omega})} = \max_{x \in \overline{\Omega}} |f(x)|.$$

Se define

$$C_0^\infty(\Omega) = C^\infty(\Omega) \cap C_0(\Omega).$$

El conjunto $C_0^\infty(\Omega)$ se lo nota generalmente con $D(\Omega)$. Además un elemento de $D(\Omega)$ se van a considerar como el espacio de *funciones test* o *funciones de prueba*.

3.6.2 El espacio $D'(\Omega)$

Sea Ω un conjunto abierto, acotado de \mathbb{R}^n . Una distribución sobre Ω es todo funcional T lineal continuo sobre $D(\Omega)$.

Si T es una distribución sobre Ω , se tiene

i) T es funcional sobre $D(\Omega)$, esto es, para cada función $\varphi \in D(\Omega)$, se le asocia un escalar que designaremos por

$$\langle T, \varphi \rangle, \quad \forall \varphi \in D(\Omega).$$

ii) T es lineal sobre $D(\Omega)$, esto es,

$$T(\alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2) = \alpha T(\varphi_1) + \beta T(\varphi_2), \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}, \quad \forall \varphi_1, \varphi_2 \in D(\Omega).$$

iii) T es continuo, es decir, que si (φ_n) es una sucesión en $D(\Omega)$ convergente a $\varphi \in D(\Omega)$, entonces

$$T(\varphi_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} T(\varphi).$$

Notación

El valor del funcional T sobre una función de prueba $\varphi \in D(\Omega)$ lo notaremos $\langle T, \varphi \rangle$ en lugar de $T(\varphi)$.

Al conjunto de todas las distribuciones se le denota $D'(\Omega)$ y se le llama espacio de las distribuciones sobre Ω .

Definición.- Sean $T_1, T_2 \in D'(\Omega)$. Se dice que $T_1 = T_2$ si y solo si para todo $\varphi \in D(\Omega)$ se cumple que

$$\langle T_1, \varphi \rangle = \langle T_2, \varphi \rangle.$$

Definición.- Sean $T_1, T_2 \in D'(\Omega)$, se pueden definir la suma de distribuciones y el producto por un escalar como sigue

$$\langle \alpha_1 T_1 + \alpha_2 T_2, \varphi \rangle = \alpha_1 \langle T_1, \varphi \rangle + \alpha_2 \langle T_2, \varphi \rangle, \quad \forall \varphi \in D(\Omega), \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}.$$

Resulta que el conjunto de distribuciones $D'(\Omega)$, tiene estructura de espacio vectorial sobre \mathbb{R} y es evidente que $\alpha_1 T_1 + \alpha_2 T_2$ es lineal y continuo, además $D'(\Omega)$ es el dual algebraico de $D(\Omega)$ que coincide con el dual topológico.

Teorema.- Un funcional lineal T sobre $D(\Omega)$ es una distribución si y solo si para cada compacto K de Ω , existen constantes $c > 0$ y $m \in \mathbb{Z}^+$ tal que

$$|\langle T, \varphi \rangle| \leq c \underset{|\alpha| \leq m}{\text{Máx}} \underset{x \in K}{\text{Máx}} |D^\alpha \varphi(x)|,$$

para cada $\varphi \in D(\Omega)$ tal que $\text{sop}(\varphi) \subset K$.

3.6.3 Convergencia

La convergencia de sucesiones en $D(\Omega)$ se define como sigue:

Sean $(\varphi_n) \subset D(\Omega)$, $\varphi \in D(\Omega)$, entonces se dice que $\varphi_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \varphi$ en $D(\Omega)$ si y solo si se verifica:

i) existe $K \subset \Omega$ con K compacto tal que

$$\text{sop}(\varphi_n) \subset K, \quad \forall n = 1, 2, \dots$$

ii) $\max_{x \in \Omega} |\varphi_n(x) - \varphi(x)| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$, uniformemente sobre K ,

$$\max_{x \in \Omega} |\partial^\alpha \varphi_n(x) - \partial^\alpha \varphi(x)| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0, \quad \text{uniformemente sobre } K,$$

siendo $\alpha \in \mathbb{N}^2$, $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2)$ y $|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2$.

3.6.4 Derivación en el sentido de las distribuciones

Una de las razones del empleo de distribuciones en el mundo de las ecuaciones en derivadas parciales (y por ello en la mecánica de medios continuos) es la posibilidad que se tiene de derivar indefinidamente cualquier distribución.

Definición.- Sea T una distribución sobre $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. La derivada $\frac{\partial T}{\partial x_i}$, $i = 1, 2$, en el sentido de las distribuciones, se define por:

$$\left\langle \frac{\partial T}{\partial x}, \varphi \right\rangle = -\left\langle T, \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right\rangle, \quad \forall \varphi \in D(\Omega),$$

$$\left\langle \frac{\partial T}{\partial y}, \varphi \right\rangle = -\left\langle T, \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right\rangle, \quad \forall \varphi \in D(\Omega),$$

siendo la derivada de T lineal y continua sobre $D(\Omega)$, por lo tanto es una distribución

Sea $f \in C^1(\Omega)$, se denota con T_f a la distribución asociada a f y esta definida por

$$\langle T_f, \varphi \rangle = \int_{\Omega} f \varphi dx, \quad \forall \varphi \in D(\Omega).$$

Las segundas derivadas $\frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}$, $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$, $\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}$ de una distribución T se define mediante la relación.

$$\left\langle \frac{\partial^2 T}{\partial x \partial y}, \varphi \right\rangle = \left\langle T, \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} \right\rangle, \quad \forall \varphi \in D(\Omega).$$

$$\left\langle \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \varphi \right\rangle = \left\langle T, \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right\rangle, \quad \forall \varphi \in D(\Omega).$$

$$\left\langle \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}, \varphi \right\rangle = \left\langle T, \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right\rangle, \quad \forall \varphi \in D(\Omega).$$

3.7 Espacios de Sobolev

Definición.- Dado un subconjunto $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ abierto, llamamos espacio de Sobolev y se denota por $H^1(\Omega)$, al conjunto de funciones u de $L^2(\Omega)$, cuyas derivadas parciales de primer orden, también pertenecen a $L^2(\Omega)$, junto a las operaciones de funciones de adición y multiplicación escalar.

Es decir

$$H^1(\Omega) = \left\{ u \in L^2(\Omega) \mid \frac{\partial u}{\partial x} \in L^2(\Omega), \text{ y } \frac{\partial u}{\partial y} \in L^2(\Omega) \right\},$$

donde, $\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}$ son derivadas parciales de u con respecto a x y y en el sentido de las distribuciones, es decir

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial u}{\partial x}, \varphi \right\rangle &= - \left\langle u, \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right\rangle, \quad \forall \varphi \in D(\Omega), \\ \left\langle \frac{\partial u}{\partial y}, \varphi \right\rangle &= - \left\langle u, \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right\rangle, \quad \forall \varphi \in D(\Omega), \end{aligned}$$

Para todo $u, v \in H^1(\Omega)$, el producto escalar está dado por:

$$\langle u, v \rangle_{1,\Omega} = \int_{\Omega} (u \cdot v + \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial v}{\partial y}) dx.$$

Es evidente que $H^1(\Omega) \subset L^2(\Omega)$.

La norma asociada al producto escalar la notamos con

$$\| u \|_{1,\Omega} = \left(\int_{\Omega} |u|^2 + \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|^2 + \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right|^2 dx \right)^{1/2}, \quad \forall u \in H_{1,\Omega},$$

Se tiene que $H^1(\Omega)$ provisto del producto escalar $(\cdot, \cdot)_{1,\Omega}$ y la norma asociada es un espacio de Hilbert.

CAPÍTULO 4

ANÁLISIS DEL MODELO Y DISCRETIZACIÓN

La mayor parte de las ecuaciones de la mecánica de medios continuos y un buen número de problemas que se presentan en la naturaleza se expresan en términos de ecuaciones en derivadas parciales con distintos tipos de condiciones adicionales, sean condiciones iniciales, de contorno. Es por ello que en este capítulo se exponen los resultados de existencia y unicidad para la solución de la ecuación de transporte de tipo parabólico, luego se estudia la discretización espacial mediante el método de elementos finitos, existe una extensa bibliografía sobre el tema pero se ha preferido usar: (Benalcázar, 1994) (Evans, 1998) (Brezis, 1983)..

4.1 Formulación del problema

En el modelo matemático se ha considerado el fenómeno de difusión, el transporte advectivo, una tasa de decaimiento (reacción química del contaminante) y unas fuentes de contaminación del medio en estudio. De esta manera, llamando $C(x, y, t)$ la concentración del contaminante en el punto (x, y) para un instante t , el modelo puede ser descrito por:

$$\frac{dC}{dt} - \text{difusión} + \text{transporte} + \text{reacción} = \text{fuente}.$$

La ecuación diferencial que modela el fenómeno de transporte de contaminación ambiental, es una ecuación diferencial parcial de tipo parabólico lineal, cuya solución la aproximaremos mediante el método de elementos finitos, el problema (P) está dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC}{dt} - \text{div}(D\nabla C) + \vec{V} \cdot \nabla C + qC = f \quad \text{sobre } \Omega \times [0, T], \\ C(x, y, t) = g(x, y, t) \quad \text{en } \Gamma_1 \times [0, T] \\ \frac{dC(x, y, t)}{dn} = 0 \quad \text{en } \Gamma_2 \times [0, T] \\ C(x, y, 0) = h(x, y). \quad (x, y) \in \bar{\Omega} \end{array} \right. \quad (4.1)$$

Para el análisis del problema (P) de contaminación atmosférica, se asumirá que $h(x, y) \in C^0(\bar{\Omega})$, además:

$$\begin{aligned} D &\in C^1(\bar{\Omega} \times [0, T]), \quad D(x, y, t) \geq \alpha > 0, \quad \forall (x, y, t) \in \bar{\Omega} \times [0, T], \quad \alpha \in \mathbb{R}, \\ f &\in C^0(\bar{\Omega} \times [0, T]), \quad f(x, y, t) \geq 0, \quad \forall (x, y, t) \in \bar{\Omega} \times [0, T], \\ q &\in C^0(\bar{\Omega} \times [0, T]), \quad q(x, y, t) \geq 0, \quad \forall (x, y, t) \in \bar{\Omega} \times [0, T], \end{aligned}$$

donde $\Omega \in \mathbb{R}^2$ es un conjunto abierto, acotado, convexo en el cual se va a estudiar la concentración del contaminante, sea $\partial\Omega$ la frontera de Ω , Γ_1 y Γ_2 son subconjuntos tales

que $\partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$ y además $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \neq \emptyset$, D es el coeficiente (función) de difusión-dispersión molecular del contaminante en el aire, depende de muchos factores, \vec{V} es la velocidad del viento en un punto (x, y) del convexo $\bar{\Omega}$ en el cual estamos haciendo nuestro estudio de la concentración de contaminantes al instante t . Su construcción se lo hará en base a los datos de las velocidades tomados en diferentes partes del dominio Ω , q representa las reacciones químicas que sufre el contaminante en la atmósfera, asumiremos que este es un dato conocido, f representa las fuentes de contaminante que existen en el dominio Ω .

Para la construcción de f se lo hará en base a la toma de información de la cantidad de contaminante que arrojan al aire las principales fuentes móviles como son los gases emitidos por los automóviles, buses, entre otros. Generalmente, f se construye mediante splines o polinomios que se obtienen mediante el método de mínimos cuadrados, ∇ operador gradiente, t la variable temporal, T el tiempo final de análisis y C es la concentración del contaminante en el aire (función incógnita).

4.1.1 Condición inicial

La condición $C(x, y, 0) = h(x, y)$ se denomina condición inicial del problema. En el presente modelo $h(x, y)$ representa la concentración del contaminante que se tiene actualmente sobre Ω . Para la construcción de h se lo hace en base a los datos del monitoreo de la concentración del contaminante que se tiene actualmente.

4.1.2 Condiciones de frontera

La derivada normal de C se define como sigue $\frac{\partial C}{\partial n} = \nabla C \cdot \vec{n}$, donde \vec{n} es el vector normal exterior a Γ . La condición de frontera $\frac{\partial C}{\partial n} = r$ se le denomina condición de frontera de Neumann. Esta condición va a representar el flujo entrante o saliente del contaminante hacia el interior o exterior respectivamente de $\bar{\Omega}$ al instante t , en el caso de que $r = 0$ la condición se denominaría condición de Neumann homogénea.

La condición $C(x, y, t) = g(x, y, t)$ sobre Γ_1 se denomina condición de Dirichlet donde $g = g(x, y, t)$ va a representar la concentración del contaminante en Γ_1 al instante t . Dependiendo de las características del problema, podemos considerar solo la condición $C(x, y, t) = 0$ sobre $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \partial\Omega$ donde Ω la tomaríamos suficientemente grande, esto significa que si nosotros estamos realizando un estudio de contaminación de una ciudad X al considerar Ω suficiente grande, asumimos que la ciudad X se encuentra localizada en el interior de Ω , que podríamos asumir que en la frontera de Ω existe contaminación despreciable en cada instante $t \in [0, T]$. Sin embargo, se deberá tomar en cuenta que

estas consideraciones solamente las podemos hacer cuando el estudio se realice sobre una ciudad completa y cuyos sectores aledaños garanticen la casi nulidad de contaminación. Esto no se hará en estudios correspondientes a zonas parciales de ciudades.

4.2 Formulación débil del problema

Primeramente se introducen los espacios V , W siguientes:

$$\begin{aligned} V &= \{v \in H^1(\Omega) / v = 0 \text{ sobre } \Gamma_1\}, \\ W &= \{v \in H^1(\Omega) / \frac{\partial v}{\partial n} = 0 \text{ sobre } \Gamma_2\}, \\ H &= L^2(\Omega) \end{aligned}$$

Para la obtención de una formulación débil de nuestro problema, primeramente multiplicaremos a los dos miembros de la ecuación diferencial (1) del problema (P) por una función $v \in V$ e integrando sobre Ω , se tiene

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} v dx - \int_{\Omega} \operatorname{div}(D \nabla C) v dx + \int_{\Omega} (\vec{V} \cdot \nabla C) v dx + \int_{\Omega} q C v dx = \int_{\Omega} f v dx.$$

Usando el teorema de divergencia de Gauss en el segundo término y la derivada bajo el signo de la integral en el primer término de la ecuación y tomando en cuenta que $\partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$, se deduce

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} C v dx + \int_{\Omega} D(\nabla C \cdot \nabla v) dx + \int_{\Omega} (\vec{V} \cdot \nabla C) v dx + \int_{\Omega} q C v dx = \\ \int_{\Omega} f v dx + \int_{\Gamma_1} D \frac{dC}{dn} v ds + \int_{\Gamma_2} D \frac{dC}{dn} v ds. \end{aligned}$$

Sobre Γ_2 se tiene la condición de frontera $\frac{\partial C}{\partial n} = 0$, además de la definición del espacio V se tiene $v = 0$. Sobre Γ_1 . Por lo que los dos últimos términos de la ecuación se anulan, con lo cual tenemos.

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} C v dx + \int_{\Omega} D(\nabla C \cdot \nabla v) dx + \int_{\Omega} (\vec{V} \cdot \nabla C) v dx + \int_{\Omega} q C v dx = \int_{\Omega} f v dx.$$

Procede de igual manera con la condición inicial, expresada en la ecuación 4.1, con lo que se obtiene:

$$\int_{\Omega} C(x, y, 0) \cdot v dx = \int_{\Omega} h v dx, \quad \forall v \in V.$$

Se define la forma bilineal siguiente:

$$a : \begin{cases} W * V \rightarrow \mathbb{R} \\ (C, v) \rightarrow a(t, C, v), \end{cases}$$

con

$$a(t, C, v) = \int_{\Omega} D(\nabla C \cdot \nabla v) dx + \int_{\Omega} (\vec{V} \cdot \nabla C) \cdot v dx + \int_{\Omega} q C v dx,$$

y la forma lineal:

$$L_t : \begin{cases} V \rightarrow \mathbb{R} \\ v \mapsto L_t(v) = \int_{\Omega} f v dx. \end{cases}$$

Se un X un espacio de Banach, provisto de la norma $\|\cdot\|_X$ seguidamente definimos:

$$L^2(0, T; X) = \left\{ \begin{array}{l} f : (0, T) \longrightarrow X / f \text{ es medible y } \|f(t)\|_X^2 \\ f \longmapsto f(t) \qquad \qquad \qquad \text{es Lebesgue integrable sobre } (0, T). \end{array} \right\}$$

La norma definida en este espacio es

$$\|f\|_{L^2(0, T; X)} = \int_0^T \|f(t)\|_X^2 dt.$$

Además, tenemos

$$C^0(0, T; X) = \{f : (0, T) \longrightarrow X / f \text{ es continua}\},$$

equipado de la norma $\|\cdot\|$ dado como $\|u(t)\|_X = \max_{t \in [0, T]} \|u(t)\|_X$, $u \in C^0(0, T; X)$.

Nuevamente se toma $X = V$.

De esta manera, la formulación débil del problema (P) queda como sigue:

Hallar $C \in L^2(0, T; V) \cap C^0(0, T; V^*)$ tal que $\frac{dC}{dt} \in L^2(0, T; V^*)$, solución débil de (P)

si verifica:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}(C(t), v)_V + a(t, C(t), v) = L_t(v), & \forall v \in V, \\ (C(0), v)_V = (q, v)_V, & \forall v \in V. \end{cases}$$

4.3 Existencia y unicidad de la solución

4.3.1 Lema de Gronwall

El lema de Gronwall, establece una cota superior para las funciones no negativas que puedan acotarse por una función lineal de su integral. Es de gran utilidad para probar la continuidad y unicidad de soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias.

Sean $g(t)$ y $v(t)$ dos funciones continuas en $C([0, T])$. Sea $h \in L^1(0, T)$ tal que $h(t) \geq 0$, c.t.p. $t \in]0, T[$ se tiene

$$v(t) \leq g(t) + \int_0^t h(\tau)v(\tau)d\tau.$$

Entonces, en $[0, T]$ se tiene que

$$v(t) \leq g(t) + \int_0^t h(\tau)v(\tau)e^{H(t)-H(\tau)}d\tau = e^{H(t)} \left[g(0) + \int_0^t g'(\tau)e^{-H(\tau)}d\tau \right], t \in [0, T],$$

con $H(t) = \int_0^t h(\tau)d\tau$, donde la segunda de esta desigualdad se cumple para funciones $g(t)$ diferenciables.

Una consecuencia muy importante del lema es que si $v(t) \in C([0, T])$ con $v(t) \geq 0$ y se cumple que

$$v(t) \leq c \int_0^t v(\tau)d\tau \quad \text{para } t \in [0, T],$$

entonces, $v(t) \equiv 0$. (Esto es inmediato haciendo $g(t) = 0$ y $h(t) = c$).

4.3.2 Teorema de J. L. Lions

Sea H un espacio de Hilbert dotado del producto escalar $\langle \cdot, \cdot \rangle$ y de la norma $\|\cdot\|_H$. Se identifican H y su dual. Sea V otro espacio de Hilbert de norma $\|\cdot\|_V$. Supongamos que $V \subset H$ con inyección continua y densa, de forma que

$$V \subset H \subset V^*.$$

Sea $T > 0$ fijo; para casi todo $t \in [0, T]$ se considera una forma bilineal $a(t; u, v) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ que verifica las propiedades

i) La función $t \rightarrow a(t; u, v)$ es medible, para todo $u, v \in V$,

$$\text{ii) } |a(t; u, v)| \leq M \|u\|_V \|v\|_V, \quad \text{c.t.p. } t \in [0, T], \quad \forall u, v \in V,$$

$$\text{iii) } a(t; v, v) \geq \alpha \|v\|_V^2 - C \|v\|_H^2, \quad \text{c.t.p. } t \in [0, T], \quad \forall v \in V,$$

donde $\alpha > 0$, M y C constantes.

Dadas $f \in L^2(0, T; V^*)$ y $u_0 \in H$, existe una única función u tal que

$$\begin{cases} u \in L^2(0, T; V) \cap C([0, T]; H) \text{ y } \frac{du}{dt} \in L^2(0, T; V^*) \\ \frac{d}{dt}(u(t), v) + a(t; u(t), v) = (f(t), v) \text{ c.t.p. } t \in [0, T], \quad \forall v \in V, \\ u(0) = u_0. \end{cases}$$

donde

$$(u, v) = \int_{\Omega} uv dx, \quad \forall u, v \in V.$$

Este teorema nos proporciona un escenario general abstracto para la existencia y unicidad de solución débil de ecuaciones diferenciales parabólicas.

4.4 Existencia de la solución de (P)

Notemos que V es un subespacio de H^1 , $H_0^1(\Omega) \subset V \subset L^2(\Omega)$ y $H_0^1 \subset L^2$.

Sea $H = L^2(\Omega)$.

A continuación, se verifican las hipótesis del teorema de Lions. En efecto,

$$\text{i) } \frac{d}{dt} (C(t), v)_v = \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t}(t) v dx, \quad \forall v \in V,$$

$$(f(t), v) = \int_{\Omega} f(x, t) v(x) dx, \quad \forall v \in V,$$

$$f \in L^2(\bar{\Omega} \times [0, T]) \iff \begin{cases} a) f \text{ es medible,} \\ b) \int_{\Omega} \left(\int_0^T |f(x, t)|^2 dt \right) dx < \infty, \end{cases}$$

$$C(t) \in V,$$

es decir, $a(t; C(t), v) = \int_{\Omega} D \nabla C(t) \cdot \nabla v dx + \int_{\Omega} (\vec{V} \cdot \nabla C(t)) v dx + \int_{\Omega} q C(t) v dx$ es medible.

Se introducen las siguientes constantes:

$$\text{ii) } M_1 = \sup_{t \in [0, T]} \|D(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)} = \sup_{t \in [0, T]} \sup_{x \in \Omega} D(x, t),$$

$$\begin{aligned}
M_2 &= \sup_{t \in [0, T]} \|q(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)} \\
M_3 &= \sup_{t \in [0, T]} \|v_1(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)}, \\
M_4 &= \sup_{t \in [0, T]} \|v_2(\cdot, t)\|_{L^2(\Omega)}, \\
M_5 &= \max\{M_3, M_4\},
\end{aligned}$$

luego, se obtiene la estimación siguiente:

$$\begin{aligned}
\text{a)} \quad \left| \int_{\Omega} (\vec{V} \cdot \nabla C) v dx \right| &= \left| \int_{\Omega} v_1 \frac{\partial C}{\partial x} v dx + \int_{\Omega} v_2 \frac{\partial C}{\partial y} v dx \right| \\
&\leq M_3 \int_{\Omega} \left| \frac{\partial C}{\partial x} v \right| dx + M_4 \int_{\Omega} \left| \frac{\partial C}{\partial y} v \right| dx \\
&\leq M_5 \int_{\Omega} \left(\left| \frac{\partial C}{\partial x} \right| + \left| \frac{\partial C}{\partial y} \right| \right) |v| dx \\
&\leq 2M_5 \|\nabla C\|_{L^2(\Omega)} \|v\|_{L^2(\Omega)} \\
&\leq 2M_5 \|C\|_V \|v\|_v.
\end{aligned}$$

Por otra parte, se tiene que

$$\begin{aligned}
|a(t; C, v)| &= \left| \int_{\Omega} D\nabla C(t) \cdot \nabla v dx + \int_{\Omega} (\vec{V} \cdot \nabla C(t)) v dx + \int_{\Omega} qC(t)v dx \right| \\
&\leq \int_{\Omega} |D\nabla C(t) \cdot \nabla v| dx + \int_{\Omega} \left| (\vec{V} \cdot \nabla C(t)) v \right| dx + \int_{\Omega} |qC(t)v| dx \\
&\leq M_1 \int_{\Omega} |\nabla C(t)| |\nabla v| dx + \int_{\Omega} \left| \vec{V} \cdot \nabla C(t) \right| |v| dx + M_2 \int_{\Omega} |C(t)| |v| dx,
\end{aligned}$$

por la desigualdad de *Cauchy – Swartz*, resulta

$$\begin{aligned}
|a(t; C(t), v)| &\leq M_1 \|\nabla C\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)} + 2M_5 \|C\|_V \|v\|_V + M_2 \|C\|_{L^2(\Omega)} \|v\|_{L^2(\Omega)} \\
&\leq M_1 \|C\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)} + 2M_5 \|C\|_V \|v\|_V + M_2 \|C\|_{H^1(\Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega)} \\
&\leq M_1 \|C(t)\|_v \|V\|_v + M_5 N_5 \|C(t)\|_v \|V\|_v + M_2 \|C(t)\|_v \|V\|_v \\
&\leq (M_1 + 2M_5 + M_2) \|C(t)\|_v \|V\|_v.
\end{aligned}$$

Se ha utilizado el hecho de que

$$\begin{aligned}
\|C(t)\|_{L^2} &\leq \|C(t)\|_{H^1}, \\
\|\nabla C(t)\|_{L^2} &\leq \|C(t)\|_{H^1},
\end{aligned}$$

como $V \subset H^1(\Omega)$ entonces $\exists c > 0$ tal que $\|v\|_{H^1(\Omega)} \leq c \|v\|_V$, $\forall v \in H^1(\Omega)$.

Es decir $a(t; C(t), v)$ es acotada, por tanto cumple la condición de continuidad.

$$\begin{aligned} \text{iii) } a(t; C(t), C(t)) &= \int_{\Omega} D |\nabla C|^2 dx + \int_{\Omega} (\vec{V} \cdot \nabla C) C dx + \int_{\Omega} q C^2 dx, \\ a(t; C(t), C(t)) &\geq \alpha \int_{\Omega} |\nabla C|^2 dx + \int_{\Omega} (\vec{V} \cdot \nabla C) C dx + \int_{\Omega} C^2 dx. \end{aligned}$$

Si $\int_{\Omega} (\vec{V} \cdot \nabla C) C dx \geq 0$, entonces

$$\begin{aligned} a(t; C(t), C(t)) &\geq \alpha \int_{\Omega} |\nabla C|^2 dx + \int_{\Omega} C^2 dx, \\ &\geq \eta \int_{\Omega} |\nabla C|^2 dx + \int_{\Omega} C^2 dx \text{ donde,} \\ \eta &= \text{Min} \{ \alpha, 1 \}, \\ &\geq \eta \|C\|_V. \end{aligned}$$

Ahora bien Si $\int_{\Omega} (\vec{V} \cdot \nabla C) C dx \geq 0$ entonces $(\vec{V} \cdot \nabla C) C \geq 0$

Como C es una función no negativa, ya que representa la concentración de contaminante, se tiene que

$$\begin{aligned} (\vec{V} \cdot \nabla C) &\geq 0, \text{ luego basta que} \\ v_1 \frac{\partial C}{\partial x} &= -v_2 \frac{\partial C}{\partial y}. \end{aligned}$$

4.5 Unicidad de la solución de P

Supongamos que existen $C_1, C_2 \in (0, T; V) \cap C^0(0, T; L^2(\Omega))$, tales que

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} (C_1(t), v) + a(t; C_1(t), v) = L_t(v), & \forall v \in V, \\ (C_1(0), v) = (h, v) & \forall v \in V. \end{cases} \quad (4.2)$$

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} (C_2(t), v) + a(t; C_2(t), v) = L_t(v), & \forall v \in V, \\ (C_2(0), v) = (h, v), & \forall v \in V. \end{cases} \quad (4.3)$$

Sea $w(t) = C_1(t) - C_2(t)$, entonces $C_1(t) = w(t) + C_2(t)$.

Reemplazando $C_1(t)$ en la ecuación 4.2, se obtiene

$$\frac{d}{dt}(w(t) + C_2(t), v) + a(t; w(t) + C_2(t), v) = L_t(v), \quad \forall v \in V. \quad (4.4)$$

Por la linealidad del producto escalar de la forma bilineal y de la derivada, resulta

$$\frac{d}{dt}(w(t), v) + \frac{d}{dt}(C_2(t), v) + a(t; w(t), v) + a(t; C_2(t), v) = L_t(v), \quad \forall v \in V, \quad (4.5)$$

y por 4.3, se tiene

$$\frac{d}{dt}(w(t), v) + a(t; w(t), v) = 0, \quad \forall v \in V. \quad (4.6)$$

De igual forma para la condición inicial se hace

$$\begin{aligned} (w(0) + C_2(0), v) &= (h, v), \quad \forall v \in V, \\ (w(0), v) + (C_2(0), v) &= (h, v), \quad \forall v \in V, \\ (w(0), v) &= 0, \quad \forall v \in V. \end{aligned}$$

Por la coercividad de la forma bilineal, se tiene que

$$a(t; w(t), w(t)) \geq \alpha \|w(t)\|_V^2 - \lambda \|v\|_V^2, \quad \alpha > 0, \lambda > 0.$$

Sea $v = w(t)$, $t \in [0, T]$ y como

$$\frac{d}{dt}(w(t), w(t)) + a(t; w(t), w(t)) = 0.$$

y dado que $\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|w(t)\|_V^2 = \frac{d}{dt}(w(t), w(t))$, entonces, por 4.6 se tiene que

$$0 = \frac{d}{dt}(w(t), w(t)) + a(t; w(t), w(t)) \geq \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|w(t)\|_V^2 + \alpha \|w(t)\|_V^2 - \lambda \|w(t)\|_V^2.$$

Por lo tanto se tiene

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|w(t)\|_V^2 + (\alpha - \lambda) \|w(t)\|_V^2 \leq 0, \\ (w(0), v) = 0 \quad \forall v \in V. \end{cases}$$

Sea $\|w(t)\|_V^2 = \varphi(t)$, entonces $\frac{d}{dt} \|w(t)\|_V^2 = \varphi'(t)$.

Luego al reordenar, reemplazar e integrar sobre $[0, T]$ se tiene

$$\int_0^t \varphi'(t) dt \leq -2\alpha \int_0^t \varphi(\tau) d\tau,$$

$$\varphi(t) \leq c \int_0^t \varphi(\tau) d\tau.$$

y por el lema de Gronwall resulta que $\varphi(t) = 0$, por lo tanto, $\|w(t)\|_V^2 = 0$, entonces, $w(t) = 0$, luego, $C_1(t) = C_2(t)$, en consecuencia, $C_1(t) = C_2(t) \quad \forall t \in [0, T]$.

4.6 Discretización espacial.

Para la resolución numérica de la ecuación en derivadas parciales de tipo parabólico uno de los métodos que se utiliza es el método de elementos finitos (M.E.F.), método que adquirido con el uso de los ordenadores una gran importancia en la resolución de problemas relacionados con la Ingeniería, física, etc., ya que nos permite resolver casos que hasta hace poco tiempo eran imposible resolverlo utilizando los métodos matemáticos existentes, para su comprensión existe una extensa bibliografía, pero se preferido usar los métodos propuesto por el Dr. Hernán Benalcazar (Benalcázar, 1994) y la tesis de Albuja-Naula (Albuja y Naula, 2001), entre otros.

4.6.1 Método de elementos finitos

Muchos problemas de importancia que aparecen en ingeniería y ciencias, en general, resultan de una complejidad matemática ya que involucran dominios con geometrías complejas que pueden ser descritos en términos de ecuaciones diferenciales parciales. Aunque las soluciones analíticas son las que más información proporcionan acerca del comportamiento de un problema dado, algunos de estos problemas no se pueden resolver, se debe recurrir entonces, a los métodos numéricos. Los usados son el de elementos finitos, de diferencias finitas, de volumen de control y de contorno, entre algunos que se han venido desarrollando y usando exitosamente, en la solución de problemas en distintas áreas de la ciencia. Aún cuando todos estos métodos constituyen una poderosa herramienta matemática, no dejan de ser métodos aproximados, por lo que debemos tener cuidado con su utilización para garantizar la calidad de las soluciones.

4.6.2 Breve historia del método de elementos finitos

El MEF por novedoso que parezca, el concepto se ha usado desde hace varios años. Por lo que la idea de representar un dominio mediante un conjunto de elementos discretos, no aparece con el MEF. El concepto de “Elementos finitos” nace con los antiguos matemáticos

que lo usaban para hallar el valor de π en forma bastante aproximada. Dicha aproximación la realizaban limitando un círculo con polígonos regulares (inscritos o circunscritos), de tal manera que los segmentos de recta (elementos finitos), aproximasen la circunferencia del círculo. De este modo, ellos estaban en capacidad de obtener estimaciones muy exactas del valor de π hasta con cuarenta dígitos. Arquímedes (287-212 a.c.) empleaba el mismo método para determinar áreas de figuras planas y volúmenes de sólidos.

Muchos han sido los investigadores que han participado en el desarrollo del MEF. Inicialmente en los años 50's lo desarrollaron ingenieros estructurales de aviones para analizar sistemas estructurales en los aviones. En 1090, Ritz, desarrollo un método para obtener soluciones aproximadas, de problemas asociados al campo de la mecánica de continuo. En 1943, Courant hizo una muy significativa extensión al Método de Ritz introduciendo funciones seccionalmente continuas, definidas sobre áreas triangulares, lo cual, conjuntamente con el principio de mínima energía potencial, le permitió estudiar problemas de torsión.

El método de Ritz, tal como fue usado por Courant, es idéntico al MEF. El cual fue presentado en 1960 por Clough, a partir de ideas diferentes: En su trabajo introdujo la aplicación de elementos finitos simples (barras y placas triangulares con cargas en su plano) al análisis de estructuras aeronáuticas, utilizando los conceptos de discretización y funciones de forma.

A partir de 1960, el M.E.F. tuvo una gran acogida en la resolución de las ecuaciones de Euler y Navier-Stokes. Desde entonces, muchos autores han contribuido al desarrollo del MEF. A partir de los años 80's, con la ayuda de computadores personales, se encuentra en una fase de gran expansión, ya que se aplica, con éxito, en problemas tridimensionales, en problemas no lineales, en problemas no permanentes y en problemas de muchas áreas distintas al análisis estructural tales: como, flujo de fluidos, transferencia de calor, contaminación atmosférica, análisis de campo eléctrico y magnético, robótica, ciencias médicas, etc.

4.6.3 Descripción matemática del método

El desarrollar un algoritmo de elementos finitos, para resolver un problema con valor de frontera PVP que comprende ecuaciones diferenciales y condiciones de contorno, según (Onate y Zarate, 2013), se requiere las siguientes etapas:

El problema debe reformularse en forma variacional.

- El dominio de variables independientes, para este caso un dominio espacial para problemas dependientes del tiempo, debe dividirse mediante una partición en subdominios, llamados elementos finitos. Asociada a la partición anterior se construye un espacio vectorial de dimensión finita, llamado espacio de elementos finitos. Siendo la solución numérica aproximada obtenida por medio de una combinación lineal en dicho espacio vectorial.

- Se obtiene una proyección del problema variacional original sobre el espacio de elementos finitos obtenido de la partición. Esto da lugar a un sistema con un número finito de ecuaciones, aunque en general con un número elevado de ecuaciones incógnitas. El número de incógnitas será igual a la dimensión del espacio vectorial de elementos finitos obtenido y, en general cuanto mayor sea dicha dimensión tanto mejor será la aproximación numérica obtenida.

- Finalmente, se debe realizar el cálculo numérico de las soluciones a través de un sistema de ecuaciones.

Con el procedimiento explicado en los pasos anteriores, nos permite construir un problema de cálculo diferencial en problema de algebra lineal. Dicho problema en general se plantea sobre espacios sumamente grandes de manera general en un espacio vectorial de dimensión infinita, la idea básica del MEF, para resolver estos problemas consiste en encontrar aproximadamente una proyección sobre un subespacio de dimensión finita, y por tanto con un número finito de ecuaciones (aunque en general el número de ecuaciones puede ser de miles o centenares de miles). La discretización en elementos finitos ayuda a construir un algoritmo de proyección sencillo, logrando además que la solución por el MEF sea generalmente muy exacta en un conjunto finitos de puntos. Estos puntos coinciden usualmente con los vértices de los elementos finitos. Para la resolución del enorme sistema de ecuaciones algebraicas pueden usarse los métodos convencionales del algebra lineal en espacios de dimensión finita, pero, se obtienen mejores resultados con métodos iterativos.

4.6.4 Discretización del dominio

Mallado triangular tipo elementos finitos

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, abierto acotado de frontera continua Γ en el sentido lipchisiana a trozos, la construcción de la malla se realizara de la siguiente forma:

1. Se fija un conjunto de puntos distintos, en la frontera y en el interior del dominio

$\bar{\Omega}$.

2. Se construye triángulos con la unión de los puntos y denotamos con τ al conjunto de todos los triángulos y numeramos a los elementos de τ , de la siguiente manera

$$\tau = \{T_i / T_i \text{ triángulo } i = 1, \dots, n\}$$



Figura 7. Mallado triangular

Tales triángulos deben satisfacer las siguientes condiciones:

- $T_i \in \tau \iff \overset{\circ}{T}_i \neq \{\emptyset\}$.
- $T_i, T_j \in \tau \implies \left\{ \begin{array}{l} T_i \cap T_j = \{\emptyset\}, \\ T_i \cap T_j = \text{un vértice}, i \neq j \text{ o}, \\ T_i \cap T_j = \text{una arista.} \end{array} \right\}$
- Si $\tilde{\Omega} = \bigcup_{T_i \in \tau} T_i$, entonces $\tilde{\Omega}$ es aproximación de $\bar{\Omega}$,
en general $\tilde{\Omega} \neq \bar{\Omega}$.

Cada T_i se llama un elemento finito, $numE$ denota el número de elementos en la triangulación. Es necesario establecer una topología τ del mallado que consiste en:

1. Lista de nodos que pertenecen a la frontera.
2. Lista de nodos internos.
3. Lista de elementos (triángulos).
4. El conjunto $N(i) = \{T \in \tau / i \in T, i \text{ nodo interno}\}$.

Ejemplo:

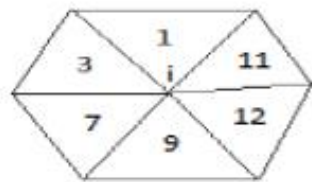


Figura 8. Elementos conectados en i

$$N(i) = \{1, 3, 7, 9, 11, 12\}.$$

La tabla que contiene $N(i)$ para $i = 1, 2, \dots, numE$, se denomina *tabla de conectividad de los elementos*.

5. Lista de arista de cada triángulo.
6. Lista de nodo de cada elemento.
7. Lista de triángulos que tienen dos nodos en la frontera.

Se llama mallado uniforme cuando los triángulos tienen aproximadamente la misma área, en caso contrario se dice que el mallado es no uniforme.

Puesto que las condiciones de frontera pueden ser homogéneas o no homogéneas, de Neumann y/o Dirichlet se debe incluir a todos los triángulos que tienen nodos en la frontera para que no se pierda la información (ejemplo: triángulos 1, 2, 23 y 24 de la figura 9). Caso contrario los nodos 1 y 20 quedarían aislados.



Figura 9. Mallado y numeración

La numeración de los nodos se realizará de izquierda a derecha, fila a fila. De igual forma se numerarán los triángulos.

4.6.5 Método de Galerkin

Problemas discretos

El método de Galerkin se basa en obtener una aproximación de la solución verdadera proyectando el espacio de soluciones sobre otro de dimensión finita, como lo veremos a continuación.

En ecuaciones elípticas lineales el procedimiento estándar consiste en llevar la ecuación diferencial a una forma variacional que en general adopta la forma:

$$\begin{cases} \text{Hallar } u \in H \text{ tal que,} \\ a(u, v) = L(v), \quad \forall v \in V. \end{cases} \quad (4.7)$$

Donde $L(\cdot)$ y $a(\cdot, \cdot)$ representan formas lineales y bilineales continuas respectivamente, continuas sobre un espacio de Hilbert, que consideremos dotado de cierto producto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$, y de una norma $\|\cdot\|$ inducida por él.

La idea es aproximar la solución 4.7 restringiendo nuestra búsqueda de la solución aproximada u_h a un nuevo espacio H_h de dimensión finita (H es de dimensión infinita), entonces el problema aproximado toma la forma.

$$\begin{cases} \text{Hallar } u_h \in H_h \text{ tal que,} \\ a(u_h, v_h) = L(v_h), \quad \forall v_h \in V_h. \end{cases} \quad (4.8)$$

El error entre la solución exacta y la solución aproximada puede acotarse gracias al lema de Céa, que en esencia afirma que la solución exacta y la solución aproximada satisfacen:

$$\exists c > 0, \text{ independiente de } H_h \text{ tal que, } \|u - u_h\|_H \leq c \inf_{v_h \in H_h} \|u - v_h\|_H.$$

Para aproximar la solución de 4.7 se va a tratar de resolver 4.8 para obtener u_h que se espera “cercana” a u . El cálculo de u_h solución de 4.8 se reduce a la solución de un sistema lineal de $N = N(h)$ ecuaciones con $N(h)$ incógnitas.

Para ello sea w_1, \dots, w_N una base de H_h .

La linealidad implica que 4.8 es equivalente a:

$$\begin{cases} \text{Hallar } u_h \in \zeta(w_1, \dots, w_2) = H_h \text{ tal que,} \\ a(u_h, v_i) = L(v_i), \quad i = 1, \dots, N. \end{cases} \quad (4.9)$$

o escribiendo u_h bajo la forma

$$u_h = \sum_{j=1}^N u_j w_j. \quad (4.10)$$

Se tiene que 4.8 es equivalente a:

$$\begin{cases} \text{Hallar } (u_1, \dots, u_N) \in \mathbb{R}^N \text{ tal que,} \\ \sum_{j=1}^N u_j a(w_i, w_j) = L(v_i), \quad i = 1, \dots, N. \end{cases} \quad (4.11)$$

Lo cual no es otra cosa que un sistema lineal de ecuaciones en los que, bajo la condición de que la forma sea coerciva y simétrica, tendrá solución única, pues su matriz resultará simétrica y definida positiva, entonces el problema de 4.8 matricialmente se puede escribir como:

$$\begin{aligned} & \text{Hallar } u \in \mathbb{R}^N \text{ tal que } Au = b, \\ & \text{donde } A = (a(w_i, w_j)) \text{ y } b = L(w_i). \end{aligned}$$

Esto indica que u_h se acercará a medida que N crece pero 4.8 será cada vez más difícil de resolver numéricamente. Para ello se elegirá H_h (es decir la base w_1, \dots, w_N) de modo que $a(w_j, w_i)$ sea frecuentemente nulo: Así la matriz será “rala” (matriz con muchos ceros) y luego fácil a almacenar y el sistema lineal $Au = b$ es fácil de resolver.

Ejemplo tipo

Sea a resolver

$$\begin{cases} -\Delta u + u = f \text{ en } \Omega \subset \mathbb{R}^2, \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0. \end{cases} \quad (4.12)$$

La formulación variacional se escribe

$$\begin{cases} \text{Hallar } u \in V \text{ tal que,} \\ a(u, v) = L(v), \quad \forall v \in V. \end{cases} \quad (4.13)$$

con

$$a(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx \, dy + \int_{\Omega} u \cdot v \, dx \, dy.$$

Notese que

$$\nabla u \stackrel{def}{=} \text{grad } u = \left(\frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \right), \quad (4.14)$$

$$L(v) = \int_{\Omega} f v dx dy, \quad \Omega \in \mathbb{R}^2, \quad (4.15)$$

y

$$V = H^1(\Omega). \quad (4.16)$$

Se supone Ω acotado. Se descompone $\bar{\Omega}$ en triángulos $T_e (e = 1, \dots, NTEL)$ tales que:

- $\bigcup_{e=1}^{NTEL} T_e = \bar{\Omega}$.
- $T_e \cap T_{e'} = \text{un lado común o bien un vértice común o bien } \emptyset$

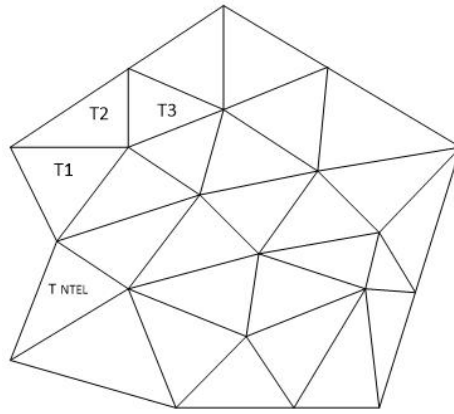


Figura 10. Mallado triangular y numeración

Notemos P_1 el espacio de polinomios de grado ≤ 1 en x e y

$$v \in P_1 \stackrel{def}{\iff} v(x, y) = b_1 x + b_2 y + b_3. \quad (4.17)$$

Se elige

$$V_h = \{v \in C(\bar{\Omega}); v|_{T_e} \in P_1 \quad e = 1, \dots, NTEL\}. \quad (4.18)$$

Notese $s_j^g (j = 1, \dots, NTN)$ los vértices de los triángulos (o nodos de la triangulación) y $w_j (j = 1, \dots, NTN)$ la función de V_h , $w_j(s_i^g) = \delta_{1j} (i = 1, \dots, NTN)$.

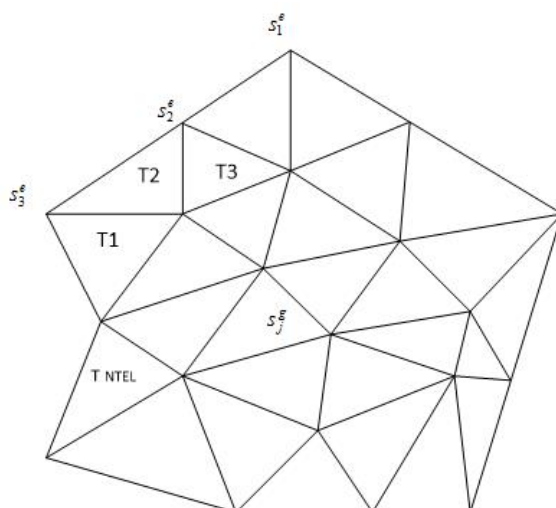


Figura 11. Numeración de los vértices

Las funciones w_1, \dots, w_{NTN} forman una base de V_h y toda función de v_h de V_h puede escribirse

$$v_h(x, y) = \sum_{j=1}^{NTN} v_j w_j(x, y). \quad (4.19)$$

Con $v_j = v_h(s_j^g)$

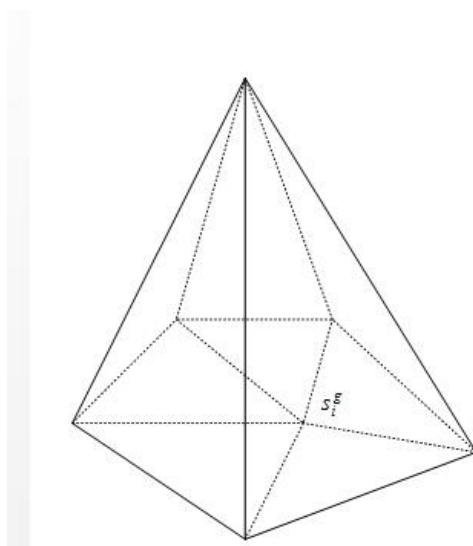


Figura 12. Función de la base V_h

Para construir la matriz $A = (a(w_j, w_i))$ y el vector $b = (L(w_i))$ se va utilizar un método de ensamblaje.

Notemos que el soporte de w_j está formado de triángulos que tienen s_j^g para el vértice luego

$$a(w_j, w_i) = 0.$$

Si s_j^g y s_i^g no son vecinos, luego la matriz A es sumamente rara!

Se tiene:

$$\begin{aligned} a_{ij} &\stackrel{NTEL}{=} a(w_j, w_i) = \int_{\Omega} \nabla w_1 \cdot \nabla w_j dx dy + \int_{\Omega} w_i w_j dx dy, \\ &= \sum_{e=1}^{NTEL} \left[\int_{T_e} \nabla w_1 \cdot \nabla w_j dx dy + \int_{T_e} w_i w_j dx dy \right] \\ &= \sum_{e=1}^{NTEL} a^e(w_j, w_i). \end{aligned}$$

Donde

$$a^e(w_j, w_i) \stackrel{def}{=} \int_{T_e} (\nabla w_1 \cdot \nabla w_j + w_i w_j) dx dy.$$

De la misma manera,

$$b_i \stackrel{def}{=} L(w_i) = \sum_{e=1}^{NTEL} \int_{T_e} f w_i dx dy = \sum_{e=1}^{NTEL} L^e(w_i)$$

con

$$L^e(w_i) \stackrel{def}{=} L(w_i) = \int_{T_e} f w_i dx dy.$$

Se tiene que $a^e(w_j, w_i) = 0$, si s_j^g y s_i^g no son vecinos!

El método de ensamblaje consiste en recorrer los elementos $T_e (e = 1, \dots, NTEL)$, en calcular las “contribuciones “ de T_e a la matriz A y al vector b y en integrar dichas contribuciones.

Cálculo de $a^e(w_j, w_i)$:

Sea T_e un triángulo de vértices (enumeración local) s_1^e, s_2^e y s_3^e (numerados en el sentido trigonométrico).

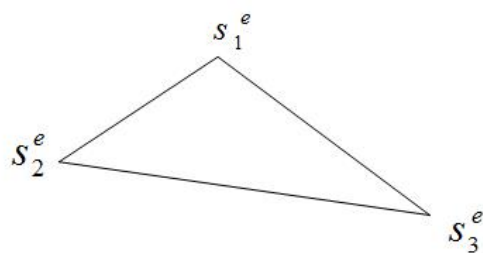


Figura 13. Vértices

Sea $(x, y) \in T_e$ se tiene

$$(x, y) = \lambda_1(x, y) s_1^e + \lambda_2(x, y) s_2^e + \lambda_3(x, y) s_3^e,$$

donde λ_1, λ_2 y λ_3 son las coordenadas baricéntricas de T_e .

Se tiene también que $\sum_{\alpha=1}^3 \lambda_\alpha = 1$.

Más precisamente,

$$\lambda_\alpha(x, y) = b_{\alpha 1}x + b_{\alpha 2}y + b_{\alpha 3} \quad (\alpha = 1, 2, 3).$$

Y si se note B la matriz 3×3 de los $b_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, 2, 3$) y la A la matriz

$$A \stackrel{def}{=} \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix},$$

donde $s_j^e = (x_j, y_j)$ ($j = 1, 2, 3$) entonces $B.A = I$ de donde

$$B = A^{-1} = \frac{1}{\det A} \begin{bmatrix} y_2 - y_3 & x_3 - x_2 & x_2 y_3 - x_3 y_2 \\ y_3 - y_1 & x_1 - x_3 & x_2 y_3 - x_3 y_2 \\ y_1 - y_2 & x_2 - x_1 & x_2 y_3 - x_3 y_2 \end{bmatrix}$$

Sobre T_e , una función $v \in V_h$ se escribe

$$v(x, y) = \sum_{\alpha=1}^3 v(s_\alpha^e) p_\alpha^e(x, y),$$

con $p_\alpha^e(x, y) = \lambda_\alpha(x, y)$ ($\alpha = 1, 2, 3$)

Notemos

$$[A_e]_{\alpha\beta} \stackrel{def}{=} \int_{T_e} (\nabla p_\alpha^e \cdot p_\beta^e + p_\alpha^e p_\beta^e) dx dy.$$

$$e = 1, \dots, NTEEL, \alpha = 1, 2, 3, \beta = 1, 2, 3.$$

La matriz $[A_e]_{\alpha\beta}$ es una matriz 3×3 llamada “submatriz de rigidez”.

Se tiene

$$[A_e]_{\alpha\beta} = \int_{T_e} (b_{\alpha 1} b_{\beta 1} + b_{\alpha 2} b_{\beta 2}) dx dy + \int_{T_e} p_\alpha^e p_\beta^e dx dy,$$

$$= \text{área} T_e \left(b_{\alpha 1} b_{\beta 1} + b_{\alpha 2} b_{\beta 2} + \frac{1}{12} \right).$$

Usando la formula

$$\int_{T_e} (p_\alpha^e)^r (p_\beta^e)^k (p_\gamma^e)^s dx dy = 2 \text{área} T_e \frac{r!k!s!}{(r+k+s+2)!}.$$

Se obtiene (con $\text{área} T_e = \frac{1}{2} \det A$)

$$(a) [A_e]_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \det A \frac{(y_\beta - y_\gamma)(y_\gamma - y_\alpha) + (x_\gamma - x_\beta)(x_\alpha - x_\gamma)}{(\det A)^2} + \frac{1}{12}$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{(y_\beta - y_\gamma)(y_\gamma - y_\alpha) + (x_\gamma - x_\alpha)(x_\alpha - x_\gamma)}{(y_1 - y_2)(x_2 - x_3) - (y_3 - y_2)(x_1 - x_2)} \right)$$

$$+ \frac{1}{24} ((y_1 - y_2)(x_2 - x_3) - (x_1 - x_2)(y_3 - y_2))$$

Y si $\alpha = \beta$

$$(b) [A_e]_{\alpha\alpha} = \frac{1}{2} \left[\frac{(y_\beta - y_\gamma)^2 + (x_\gamma - x_\beta)^2}{(y_1 - y_2)(x_3 - x_2) - (y_3 - y_2)(x_1 - x_2)} \right]$$

$$+ \frac{1}{24} ((y_1 - y_2)(x_3 - x_2) - (x_1 - x_2)(y_3 - y_2)).$$

Y

$$(c) L^e(p_\alpha^e) \approx \frac{1}{2} ((y_1 - y_2)(x_3 - x_2) - (x_1 - x_2)(y_3 - y_2))$$

$$* f \left(\frac{1}{3}(x_1 + x_2 + x_3), \frac{1}{3}(y_1 + y_2 + y_3) \right)$$

$$* \left[\frac{1}{3} b_{\alpha 1} (x_1 + x_2 + x_3) + \frac{1}{3} b_{\alpha 2} (y_1 + y_2 + y_3) \right],$$

que corresponde al cálculo aproximado:

$$L^e(p_\alpha^e) = \int_{T_e} f p_\alpha^e dx dy \stackrel{def}{=} \{b_e\}_\alpha$$

$$\approx \text{área } T_e \cdot f \left(\frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 s_\alpha^e \right) \cdot p_\alpha^e \left(\frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 s_\alpha^e \right)$$

Los cálculos precedentes fueron efectuados con una enumeración “local” de los vértices del triángulo T_e estos vértices s_1^e , s_2^e y s_3^e son los vértices

$$s_{GLO(1,e)}^e, s_{GLO(2,e)}^e, s_{GLO(3,e)}^e,$$

en una “enumeración global”.

$GLO(\alpha, e) \stackrel{def}{=} \text{Número en la numeración global del vértice } \alpha (\alpha = 1, 2, 3) \text{ del triángulo } T_e$

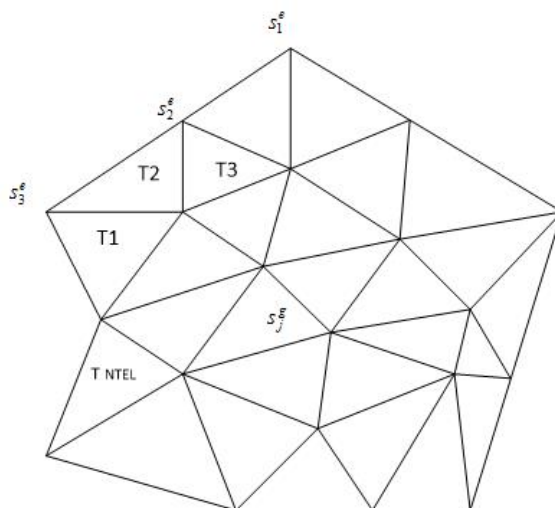


Figura 14. Numeración del malla

GLO es un arreglo de 3 filas y NTEL columnas.

Por ejemplo

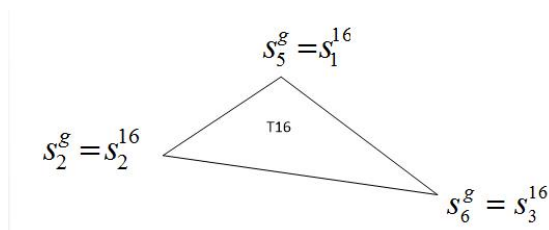


Figura 15. Ejemplo

$$GLO(2, 16) = 4,$$

$$GLO(1, 16) = 5,$$

$$GLO(3, 16) = 6,$$

Si $i = GLO(\alpha, e)$ y $j = GLO(\beta, e)$ se tiene

$$a^e(w_i, w_j) = [A_e]_{\alpha\beta},$$

de donde

$$a_{i,j} = a(w_i, w_j) = \sum_{\alpha=1}^{NTEL} \sum_{\alpha\beta}^3 \delta_{i,GLO(\alpha,e)} \delta_{i,GLO(\beta,e)} [A_e]_{\alpha\beta},$$

$$i, j = 1, \dots, NTN,$$

$$b_i = \sum_{\alpha=1}^{NTEL} \sum_{\alpha\beta}^3 \delta_{i,GLO(\alpha,e)} \{b_e\}_\alpha \quad i = 1, \dots, NTN.$$

Hay que considerar que para el cálculo de $[A_e]$ y $\{b_e\}$ hemos debido disponer de las coordenadas (x_α, y_α) de los vértices s_α^e ($\alpha = 1, 2, 3$) de T_e .

Luego, se debe disponer de un arreglo COORD con 2 filas y NTN columnas tal que:

COORD $[k, j]$ = coordenada de k de s_j^g

Se tiene entonces

$$x_\alpha = COORD[1, GLO[\alpha, e]],$$

$$y_\alpha = COORD[2, GLO[\alpha, e]],$$

ya que $j = GLO(\alpha, e)$.

Programa

De cálculo de la matriz A y del vector b (Sistema de dimensión NTN):

1) Construcción de la malla

El resultado son los arreglos:

$GLO[3, NTEL]$, $COOR[2, NTN]$, $KIND[NTN]$ con,

$$KIND[j] = \begin{cases} 0 & \text{si } s_j^g \notin \Gamma_1 \\ 1 & \text{si } s_j^g \in \Gamma_1 \end{cases}$$

$NTEL$ = números total de triángulos,

NTN = número total de nodos (bordes incluidos).

Programa

(*) $A \leftarrow 0$

$b \leftarrow 0$

para $e := 1$ hasta $NTE \not\equiv$ hacer

comienzo para $\alpha := 1, 2, 3$ hacer

comienzo $i := GLO[\alpha, e];$

$x[\alpha] := COORD[1, i];$

$y[\alpha] := COORD[2, i]$

fin;

Cálculo A_e de según (a) y (b);

para $\alpha := 1, 2, 3$ hacer

comienzo $i := GLO[\alpha, e];$

cálculo de $\{b_e\}_\alpha$ según (c);

$b[i] := b[i] + \{b_e\}_\alpha;$

para $\beta := 1, 2, 3$ hacer

comienzo $j := GLO[\alpha, e];$

(**) $A[i, j] := A[i, j] + [A_e]_{\alpha\beta}$

fin;

fin;

fin;

Considerando las condiciones de Dirichlet

Si $u = g$ sobre Γ_1 ; para $s_j^g \in \Gamma_1$ basta con fijar $b_i = g(s_j^g)$ y se reemplaza la columna i de A por

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow i$$

Las otras coordenadas de son modificadas así:

$$b_j \leftarrow b_j - g(s_j^g)A_{ij} \text{ para } j = 1, \dots, NTN, \quad j \neq i$$

De donde se obtiene el algoritmo.

Para $i:=1$ hasta NTN hacer

si $KIND[i]:=1$ entonces

Inicio $b[i]:=g(COORD[1,i],COORD[2,i])$

$$(\text{= } g(s_i^g));$$

$$A[i, i] = 1;$$

para $j:=1$ hasta NTN con $j \neq i$ hacer

comienzo $b[j]:=b[j]-b[j] \ast A[i, j];$

$$A[j, i] := A[i, j] := 0$$

fin;

fin;

Almacenamiento de la matriz A .

La matriz A tiene numerosos elementos nulos. Se define luego

$LBANDE \stackrel{def}{=} \text{ancho de banda} = \text{números de diagonales no nulas}$

Se sabe que $a_{i,j} = 0$ si los vértices s_i^g y s_j^g no son vecinos. De donde se obtiene:

$$LBANDE = \max_{s_i^g \text{ y } s_j^g \text{ vecinos}} |j - i|$$

Es decir:

$$LBANDE := 0;$$

para $e:=1$ hasta $NTEL$ hacer

$$LBANDE := \max\{|GLO(1, e) - GLO(2, e)|,$$

$$|GLO(1, e) - GLO(3, e)|,$$

$$|GLO(2, e) - GLO(3, e)|\}$$

Se puede almacenar la matriz A en un arreglo $ZAG[NTN, LBANDE + 1]$

Se tiene con $ZAG[i, j - i + 1] = A[i, j]$ con $j \geq i$

Basta entonces reemplazar la fila (*) del programa por

$$ZAG \leftarrow 0$$

Y la fila (**) por

Si $j \geq i$ entonces

$$ZAG[i, j - i + i] := ZAG[i, j - i + i] + [A_e]_{\alpha, \beta}$$

CAPÍTULO 5

SIMULACIÓN NUMÉRICA

5.1 Introducción

Para la simulación del problema de contaminación atmosférica, se empleara dos herramientas computacionales; Matlab con su herramienta Pdetool y Freemfem++, cada uno de los cuales presenta diferente grado de dificultad.

5.1.1 Pdetool de Matlab

Matlab es acrónimo de **Matrix Laboratory** (Laboratorio de Matrices) es un software muy potente que nos permite realizar muchas actividades que empleen cálculos matemáticos, es muy versatil ya que integra análisis numérico, matrices, procesamiento de señales, entre otros.

Una de las herramientas (Toolbooks) con la que cuenta es PdeTool, el cual permite resolver ecuaciones diferenciales parciales, esta herramienta presenta un entorno interactivo en donde se puede ingresar todos los parametros de la ecuación y se obtiene la solución numérica de la misma (pdetool,2017).

Al escribir *pdetool* en la ventana de comandos de Matlab, se puede ingresar a la interfaz de esta herramienta, el cual se puede apreciar en la figura **16**.

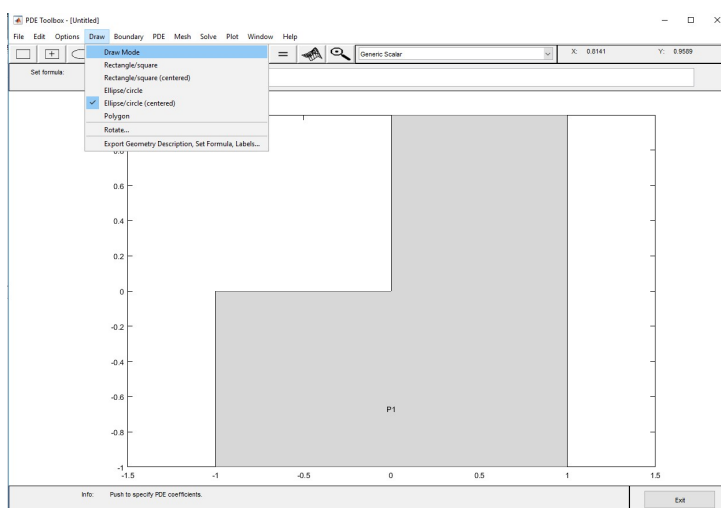


Figura 16. Interface de PdeTool

Dentro de la barra de menú, se puede ingresar a diferentes modos de trabajo de esta toolbox, siendo los más destacados los siguientes:

DrawMode: permite dibujar de manera sencilla la región del problema, es un ambiente amigable y partiendo de figuras elementales se puede obtener cualquier región.

BoundaryMode: nos permite dividir la región previamente dibujada en diferentes segmentos en los que se puede definir las condiciones iniciales las cuales pueden ser de dos tipos: de Neumann o de Dirichlet.

PDEMode: permite seleccionar el tipo de ecuación que se quiere resolver (elíptica, hiperbólica o parabólica), en el presente trabajo se resolvera una ecuación diferencial del tipo parabólica.

MeshMode: permite definir el mallado para la resolución del problema.

Plot Solution: permite visualizar el resultado de forma gráfica.

5.1.2 FreemFem++

Es un software libre que permite resolver ecuaciones en derivadas parciales utilizando el método de elementos finitos. FreemFem++ no tiene un editor de texto en su entorno por lo que es necesario escribir el código en un editor de texto y guardarlo con la extensión .pde y después se abre y compila en freemfem++ (Eliseo,2010).

Para la **generación de malla** es necesario describir parametricamente cada lado de la superficie en sentido antihorario. A cada lado se puede asociar una equiteta mediante el comando *label*, lo cual es útil al momento de añadir las condiciones de contorno.

Los principales comandos empleados son:

border: permite definir un segmento del contorno.

mesh: permite general la malla, para esto también puede emplearse el comando **buildmesh**.

label: da etiquetas a los lados del contorno, varios lados pueden tener la misma etiqueta si van a tener la misma condición de contorno.

Es importante tener en consideración que el contorno de la superficie se debe describir en el sentido antihorario, es decir, de derecha a izquierda. Además, se puede realizar dos mallados al mismo tiempo con el comando *plot* y la opción **ps=:** permite generar el fichero postscript.

5.2 Área de estudio

5.2.1 Definición de la zona de estudio.

Para la simulación numérica de los contaminantes CO y NO₂, se escogió la zona urbana de Quito, la ciudad cuenta con un área total de 4228.5 kilómetros cuadrados (km^2), de

los cuales 425.9 km^2 corresponden al área urbana, su altura promedio en esta zona es de 2810 metros sobre el nivel del mar (m.s.n.m.). Quito se localiza en la parte occidental de la cordillera de los Andes, rodeado por montañas, una especie de barrera natural que dificulta la libre circulación del viento (Secretaría Ambiente, 2017). La ubicación de la ciudad afecta directamente en la eficiencia de la quema de combustible fósiles, haciéndole mayor en los motores de los vehículos (procesos de combustión), ya que al haber menor disponibilidad de oxígeno en relación al nivel del mar, se genera mayor cantidad de contaminantes primarios en el aire.

Para la definición del dominio Ω utilizado en el estudio de la dispersión de los dos contaminantes, primeramente se procedió a seleccionar un punto de referencia que pertenece al dominio siendo de coordenadas $(-0.21616, -78.50418)$, que corresponde a un punto geográfico ubicado en la parte sur del parque el Alameda. En la figura 17 se muestra la ubicación de este punto de la ciudad, usando Google Earth, para el presente trabajo el punto de referencia seleccionado va a ser de coordenadas cartesianas $(0, 0)$.



Figura 17. Ubicación del Punto de referencia

5.2.2 Estaciones de monitoreo

Como se mencionó en el capítulo 1, la ciudad de Quito cuenta con 9 estaciones de monitoreo de las cuales 7 se encuentran dentro de la zona urbana y 2 en los valles de Tumbaco y los Chillos respectivamente que no son considerados en el presente trabajo; en la tabla 8 se presentan las coordenadas cartesianas de dichas estaciones respecto al punto de referencia previamente definido, y en la figura 18, usando Google earth se presenta la ubicación de las estaciones de monitoreo en el mapa de la ciudad de Quito.

Tabla 8.*Coordenadas cartesianas de las estaciones de monitoreo*

| Estación | x (Km) | y (Km) |
|------------|------------|------------|
| Belisario | 1.47067507 | 4.04068247 |
| Carapungo | 6.11947762 | 13.123353 |
| Centro | 0.71879753 | 0.41500616 |
| Cotocollao | 1.03362612 | 11.8148727 |
| El Camal | 1.92496734 | 3.33421666 |
| Guamani | 4.70264514 | 12.9208215 |

**Figura 18.** Ubicación de las estaciones de monitoreo

5.2.3 Selección de los puntos de conteo del flujo vehicular

Con la información proporcionada por la EMMOP, se procedió a seleccionar cuarenta y dos (42) sectores, que los denominaremos puntos de conteo de flujo vehicular, los mismos que una vez contabilizados la cantidad de medios de transporte que pasan presentan un alto tráfico de vehículos, estos lugares seleccionados corresponden a la parte norte, centro y sur de Quito y se ubican dentro del dominio Ω . En la tabla 9 se presentan las coordenadas cartesianas de cada uno de los puntos del conteo del flujo vehicular con respecto al punto de referencia previamente definido y en la figura 19, usando Google Earth se ubican los puntos del conteo del flujo vehicular en el mapa de la ciudad de Quito.

Tabla 9.*Coordenadas cartesianas de los puntos de flujo vehicular*

| Punto | x (km) | y(km) | Punto | x (km) | y(km) |
|--------------|---------------|--------------|--------------|---------------|--------------|
| P1 | -0.40181933 | 5.74596739 | P22 | -1.46955613 | -10.4572465 |
| P2 | -0.33811476 | 6.45114551 | P23 | -3.7744982 | -5.59603997 |
| P3 | 1.64002499 | 5.71951204 | P24 | -0.39566 | 1-7.549639 |
| P4 | 0.65712824 | 7.5113103 | P25 | 1.3498507 | 1.60869609 |
| P5 | -1.28257553 | 3.52384732 | P26 | -2.16572802 | 11.1414596 |
| P6 | 1.1477932 | 6.509583 | P27 | -3.7007036 | 8.41871813 |
| P7 | 1.18578871 | 9.65747405 | P28 | 0 | 13.73 |
| P8 | -0.85454716 | 6.08024252 | P29 | -2.19013838 | 13.8276279 |
| P9 | -0.3140954 | 8.99451744 | P30 | -2.60195839 | 8.0078844 |
| P10 | -2.08983335 | 9.05188912 | P31 | -0.31877913 | -3.03329522 |
| P11 | -1.9653326 | 10.110759 | P32 | -1.95729916 | -2.69404528 |
| P12 | 2.02960357 | 4.5585973 | P33 | -2.27095009 | -6.23958217 |
| P13 | 1.14498528 | 4.95954723 | P34 | -2.76073581 | -8.0180258 |
| P14 | 0 | 1.37 | P35 | 0 | -1.27 |
| P15 | -0.6207044 | 11.843746 | P36 | -3.75699578 | -8.05711379 |
| P16 | 1.9091848 | 1.90919182 | P37 | -4.7912988 | -9.82386664 |
| P17 | 1.22743264 | 2.51662654 | P38 | -4.77863129 | -6.5773538 |
| P18 | 3.0078649 | 3.11474698 | P39 | -1.73848222 | -5.049087 |
| P19 | -2.7714777 | -4.4352291 | P40 | -1.1551367 | -8.219225 |
| P20 | 0.25082735 | 0.8747489 | P41 | -2.75404844 | -9.40907644 |
| P21 | 0.55366823 | 0.73474587 | P42 | 0.16116322 | -2.30437115 |

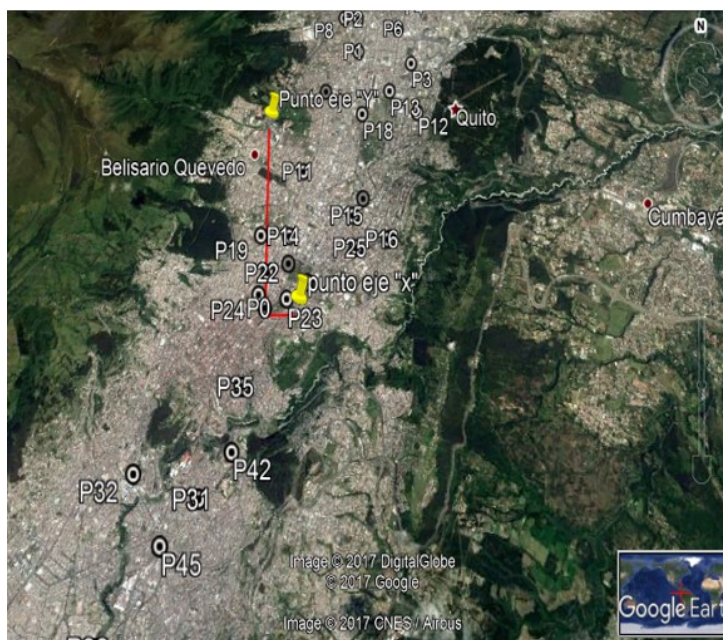


Figura 19. Ubicación de los puntos seleccionados del flujo vehicular

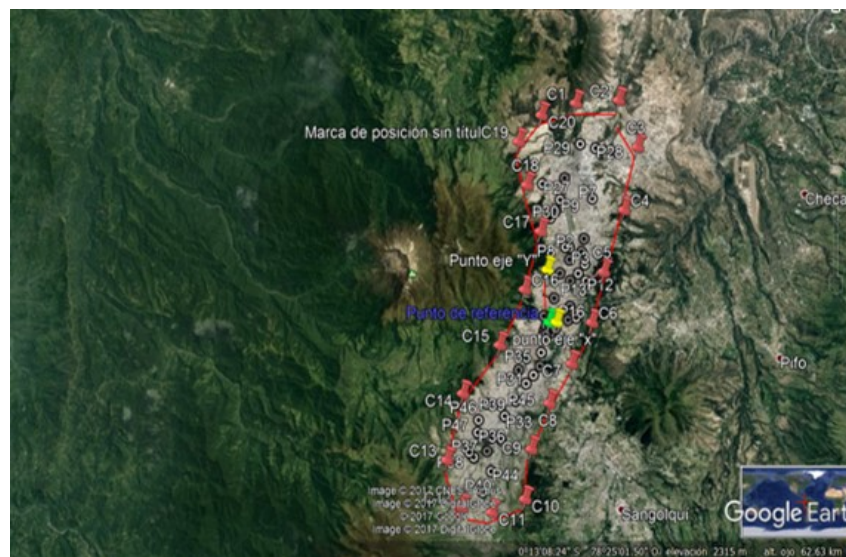
5.2.4 Contorno del dominio de estudio

Para la determinación del contorno para el dominio Ω del área estudio, se ubican veinte (20) puntos alrededor de la ciudad, procediendo a unir con segmentos de recta para de esta manera limitar el dominio Ω seleccionando la frontera de estudio para la dispersión de los dos contaminantes en estudio; en Tabla 10 se presentan las coordenadas cartesianas de los puntos del contorno respecto al punto de referencia seleccionado anteriormente, usando Google Earth se muestra la ubicación de los puntos del contorno del dominio de Ω en el mapa de la ciudad de Quito.

En el interior del contorno del dominio Ω de estudio quedan ubicados las estaciones de monitoreo y los puntos de conteo del flujo vehicular seleccionados anteriormente. Para el presente estudio dominio Ω lo consideramos sumamente grande de modo que la ciudad se ubica en su interior, de esta manera consideramos que en la frontera de Ω existe contaminación despreciable para cada instante de tiempo

Tabla 10.*Coordenadas cartesianas de los puntos del contorno*

| Punto | x (km) | y(km) | Punto | x (km) | y(km) |
|-------|-------------|-------------|-------|-------------|-------------|
| C1 | 2.75921845 | 15.6486042 | C11 | -9.13390975 | -10.8855773 |
| C2 | 6.3645223 | 15.752874 | C12 | -11.3067308 | -9.48764664 |
| C3 | 7.61491098 | 12.1864692 | C13 | -10.3540182 | -7.25009701 |
| C4 | 6.71805667 | 7.46118721 | C14 | -7.50502066 | -3.990572 |
| C5 | 4.52027184 | 3.40627986 | C15 | -4.1657311 | 10.73456409 |
| C6 | 3.3979288 | 0.11865857 | C16 | -2.43603301 | 2.04405068 |
| C7 | 2.17265488 | -2.58920273 | C17 | -0.57089541 | 6.52507306 |
| C8 | -0.29249716 | -5.58234229 | C18 | -2.08331594 | 9.80103029 |
| C9 | -3.10887595 | -8.54183764 | C19 | -3.39834841 | 12.6825915 |
| C10 | -3.89040081 | -11.9738416 | C20 | -0.2645785 | 15.6076225 |

**Figura 20.** Ubicación de los puntos del contorno del dominio

5.3 Cálculo de emisiones

Para el cálculo de las emisiones vehiculares del CO y NO_2 sobre el dominio Ω , se utiliza la ecuación:

$$Em = Fe \cdot Nveh, \quad (5.1)$$

donde Em es la cantidad de sustancia emitida por mes,

Fe es el factor de emisión que corresponde a la masa de contaminante que emite el vehículo a la atmósfera por cada kilometro que recorre por ejemplo $[g/km]$ y

$Nveh$ es el número de vehículos que transitan en un mes por dicho punto. De esta manera se obtiene la cantidad de sustancia emitidas en un mes. Las unidades de Em son $[g/km \cdot mes]$.

Para el cálculo de la emisión de sustancias por unidad de volumen, se utiliza la ecuación.

$$Em_a = \frac{Em}{l \cdot a}, \quad (5.2)$$

donde l es el ancho y

a es la altura del volumen, de esta manera se obtiene la cantidad de sustancia emitida por unidad de volumen en un mes. Las unidades son $[Kg/km^3 \cdot mes]$.

En el presente trabajo para determinar el volumen de control, se considera para el ancho una longitud de $0.1km$ y la altura de $1km$.

5.4 Datos de entrada para el modelo matemático de difusión-reacción

Los datos de entrada que se necesita para el modelo matemático de difusión-reacción son: función de condición inicial, función fuentes de emisión, coeficiente de difusión y las condiciones de frontera. Las mismas que serán utilizados en los programas de Matlab de Pdetool y Frefemm++ para las simulaciones.

5.4.1 Función condición inicial

La función a obtener es de la forma: $C = a + bx + cy + dxy + ex^2 + fy^2$, donde C corresponde a la concentración del contaminante en la atmósfera, a, d, c, d, e, f son coeficientes de las variables a determinar. Se construyen para los contaminantes CO y NO_2 ; en base a los datos de la concentración de los contaminantes en la aire obtenidos de REMMQ, y las coordenadas cartesianas de las estaciones de monitoreo determinadas anteriormente, para ello utilizamos el programa Microsoft office Excel 2007 y mediante una regresión lineal se procede a obtener la función de condición inicial para los dos contaminantes, para ello debemos considerar que el coeficiente de determinación R^2 sea lo más cercano a 1, los resultados se presentan en las tablas 11 y 12.

Para **NO2**

Tabla 11.*Función condición inicial NO₂*

| <i>NO₂</i> | x | y | xy | <i>x²</i> |
|-----------------------|-------------|-------------|------------|----------------------|
| 18286.8 | 1.47067507 | 4.04068247 | 5.94253099 | 2.16288517 |
| 20960 | 6.11947762 | 13.123353 | 80.3080649 | 37.4480063 |
| 21895.6 | -0.71879753 | -0.41500616 | 0.2983054 | 0.51666989 |
| 18553.8 | 1.03362612 | 11.8148727 | 12.2121611 | 1.06838296 |
| 24093.7 | -1.92496734 | -3.33421666 | 6.41825818 | 3.70549926 |
| 14300.8 | -4.70264514 | -12.9208215 | 60.7620385 | 22.1148713 |

Coefficiente de determinación de $R^2 = 0.99980383$.

Ecuación $C = 784.8 - 115 x + 32.7 y - 41.7 xy + 96.6 x^2$, $(x, y) \in \Omega$.

Para **CO**

Tabla 12.*Función condición inicial CO*

| CO | x | y | xy | <i>x²</i> |
|-----------|-------------|-------------|------------|----------------------|
| 424678 | 1.47067507 | 4.04068247 | 5.94253099 | 2,16288517 |
| 444410 | 6.11947762 | 13.123353 | 80.3080649 | 37,4480063 |
| 542609 | -0.71879753 | -0.41500616 | 0.2983054 | 0,51666989 |
| 588923 | 1.03362612 | 11.8148727 | 12.2121611 | 1,06838296 |
| 496887 | -1.92496734 | -3.33421666 | 6.41825818 | 3,70549926 |
| 413500 | -4.70264514 | -12.9208215 | 60.7620385 | 22,1148713 |

Coefficiente de determinación de $R^2 = 0.8760$,

Ecuación $C = 452097.7 - 68410 x + 24060.7 y - 7947.7 xy + 19525 x^2$, $(x, y) \in \Omega$.

5.4.2 Función fuentes de emisión

La función fuentes de emisión es de la forma: $f = a + bx + cy + dxy + ex^2 + gy^2$, donde f corresponde a la emisión de contaminantes por parte de las fuentes móviles en los puntos de conteo vehicular, a, b, c, d, e, g son los coeficientes de las variables. Se lo construye para los contaminantes CO y NO₂, para ello de los 42 puntos que corresponden al conteo del flujo vehicular determinados anteriormente se procede a formar 9 grupos, procediendo

a determinar el promedio del número de vehículos que atraviesan por el nuevo punto y las coordenadas cartesianas del mismo con relación al punto de referencia seleccionado anteriormente. Con los nuevos puntos y utilizando el programa Microsoft office Excel 2007 mediante una regresión lineal se procede a obtener la función fuentes de emisión para los contaminantes en estudio, para ello consideramos al coeficiente de determinación R^2 lo más cercano a 1; los resultados se presentan en las tablas 13 y 14.

Para NO_2

Tabla 13.

Función fuente de emisión para NO_2

| Número de autos | Cantidad de sustancia | Emisión de sustancia | x | y | xy | x^2 |
|-----------------|-----------------------|----------------------|-------------|------------|------------|------------|
| 1594550 | 42686.1063 | 426861.035 | -3.10652699 | -9.0729344 | 28.1853156 | 9.65050996 |
| 1662073 | 44493.6942 | 444936.942 | -3.14064045 | -5.8655157 | 18.421476 | 9.86362242 |
| 1433266 | 38368.5308 | 383685.308 | -0.97727855 | -2.7478815 | 2.68496352 | 0.95507337 |
| 1134385 | 30367.48645 | 303674.865 | 0.6784201 | 1.22217165 | 0.82914581 | 0.46025383 |
| 1904063 | 50971.76651 | 509717.665 | 1.37706259 | 4.19214037 | 5.77283969 | 1.89630139 |
| 2128768 | 56987.11936 | 569871.194 | 0.04208804 | 6.45964974 | 0.27187398 | 0.0017714 |
| 2090235 | 55955.59095 | 559555.91 | 0.50960718 | 8.7211006 | 4.44433552 | 0.25969948 |
| 1863137 | 49876.17749 | 498761.775 | -1.91679984 | 10.9851029 | -21.056243 | 3.67412164 |
| 875491 | 23436.89407 | 234368.941 | -0.77539835 | -7.884432 | 6.11357556 | 0.6012426 |

Coficiente de determinación de $R^2 = 0.875962$.

Ecuación $f = 60862 - 5869 x + 42317 y - 1459 xy + 798.8 x^2$, $(x, y) \in \Omega$.

Para CO ,

Tabla 14.
Función fuente de emisión de CO

| Número de autos | Cantidad de sustancia | Emisión de sustancia | x | y | xy | x^2 |
|-----------------|-----------------------|----------------------|-------------|------------|------------|------------|
| 1594550 | 7175.475 | 71754.75 | -3.1065269 | -9.0729344 | 28.1853156 | 9.65050996 |
| 1662073 | 7479.3285 | 74793.285 | -3.14064045 | -5.8655157 | 18.421476 | 9.86362242 |
| 1433266 | 6449.697 | 64496.97 | -0.97727855 | -2.7478815 | 2.68496352 | 0.95507337 |
| 1134385 | 5104.7325 | 51047.325 | 0.6784201 | 1.22217165 | 0.82914581 | 0.46025383 |
| 1904063 | 8568.2835 | 85682.835 | 1.37706259 | 4.19214037 | 5.77283969 | 1.89630139 |
| 2128768 | 9579.456 | 95794.56 | 0.04208804 | 6.45964974 | 0.27187398 | 0.0017714 |
| 2090235 | 9406.0575 | 94060.575 | 0.50960718 | 8.7211006 | 4.44433552 | 0.25969948 |
| 1863137 | 8384.1165 | 83841.165 | -1.91679984 | 10.9851029 | -21.056243 | 3.67412164 |
| 875491 | 3939.7095 | 39397.095 | -0.77539835 | -7.884432 | 6.11357556 | 0.6012426 |

Coefficiente de determinación de $R^2 = 0.87596$.

Ecuación $f = 362061.7 - 34914 x + 25174 y + 8680.4 xy - 4752 x^2$, $(x, y) \in \Omega$.

5.4.3 Coeficientes de difusión.

La difusión molecular es un proceso físico que ocurre cuando las diferentes especies que componen una mezcla (de líquidos o gases, etc) se mueven bajo la influencia de gradientes de concentración, este fenómeno juega un papel importante en una gran variedad de fenómenos atmosféricos. Por ejemplo, la difusión afecta a la velocidad de movimiento de gases. en general, el coeficiente de difusión (o flujo) se determina como el producto de un gradiente de concentración (una propiedad específica de cada especie química) y un coeficiente de difusividad (que es función del tipo de mezcla). Para el presente trabajo se utilizo los valores de difusividad de un conjunto de contaminantes recogidos en (Massman, 1998), ver anexo. En el presente trabajo. utilizamos los siguientes valores para los contaminantes.

$$\text{CO} = 0.00004683 \text{ km}^2/\text{mes}$$

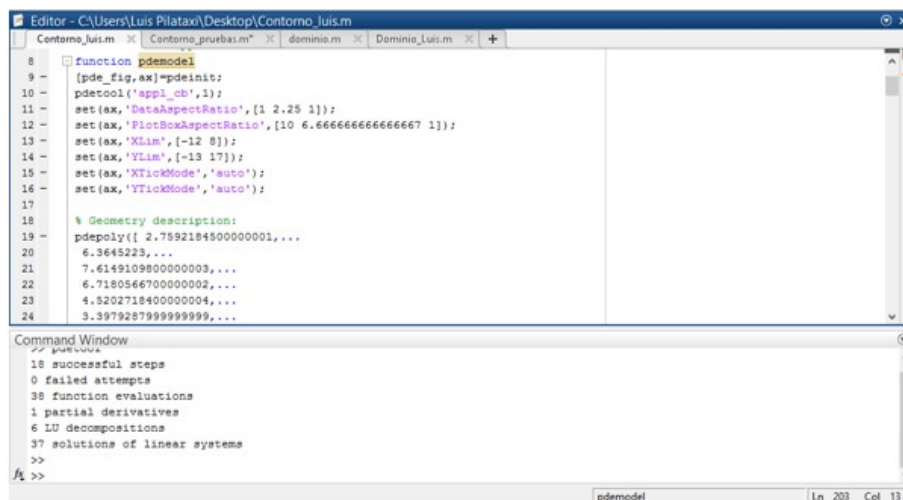
$$\text{NO}_2 = 0.00003528 \text{ km}^2/\text{mes}$$

5.5 Construcción del contorno y mallado del dominio de Ω

Tanto en Matlab, como en Femfree++ se construye primeramente el contorno del dominio Ω para el estudio del problema de contaminación atmosférica de los dos contaminantes, dicha construcción es diferente en cada uno de los softwares, ya que Matlab se puede definir el contorno de manera gráfica empleando figuras geométricas sencillas y operaciones como unión e intersección o se puede definirla mediante código a través de las coordenadas paramétricas (como es el que se emplea en el presente trabajo). Mientras que en FemFree++, solo se puede definir el contorno empleando coordenadas paramétricas ingresadas mediante un editor de texto.

5.5.1 En Matlab.

Previo a la resolución del problema se procedió a *generar el contorno*, para ello se crea un archivo.m llamado contorno_luis.m, en la que se describe las coordenadas del contorno del dominio de Ω utilizando los puntos de la tabla 9, lo cual se puede apreciar en la figura 21.



```

Editor - C:\Users\Luis Pilataxi\Desktop\Contorno_luis.m
Contorno_luis.m  Contorno_pruebas.m  dominio.m  Dominio_luis.m  +
8  function pdemodel
9  [pde_fig,ax]=pdeinit;
10 pdetool('appl_cb',1);
11 set(ax,'DataAspectRatio',[1 2.25 1]);
12 set(ax,'PlotBoxAspectRatio',[10 6.666666666666667 1]);
13 set(ax,'XLim',[-12 8]);
14 set(ax,'YLim',[-13 17]);
15 set(ax,'XTickMode','auto');
16 set(ax,'YTickMode','auto');
17
18 % Geometry description:
19 pdepoly([ 2.7592184500000001,...
20          6.3645223,...
21          7.4149109800000003,...
22          6.7180566700000002,...
23          4.5202718400000004,...
24          3.3979287999999999,...

```

```

Command Window
pdemodel
18 successful steps
0 failed attempts
38 function evaluations
1 partial derivatives
6 LU decompositions
37 solutions of linear systems
>>

```

Figura 21. Descripción del dominio empleando Matlab

Para generar gráficamente el contorno del dominio de Ω , en la ventana de command window se digita Pdetool y se recupera al archivo contorno_luis.com, lo cual se presenta en la figura 22.

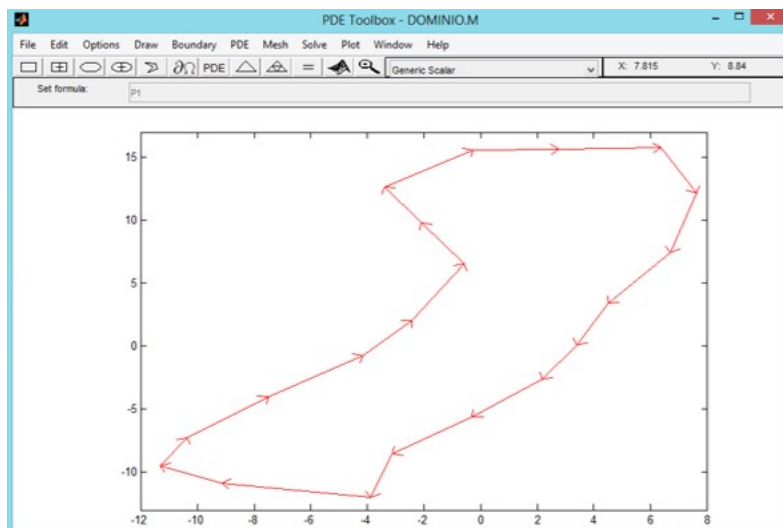


Figura 22. Representación gráfica del contorno empleando Matlab

Finalmente se procedio a generar el mallado el cual se presenta en la figura 23 donde se aprecia el dominio de Ω del problema con el mallado triangular, cabe destacar que PDETool presenta una interfaz gráfica para que el número de triángulos sea facilmente modificable con un par de iconos, tal como si se estuviera haciendo zoom en una imagen.

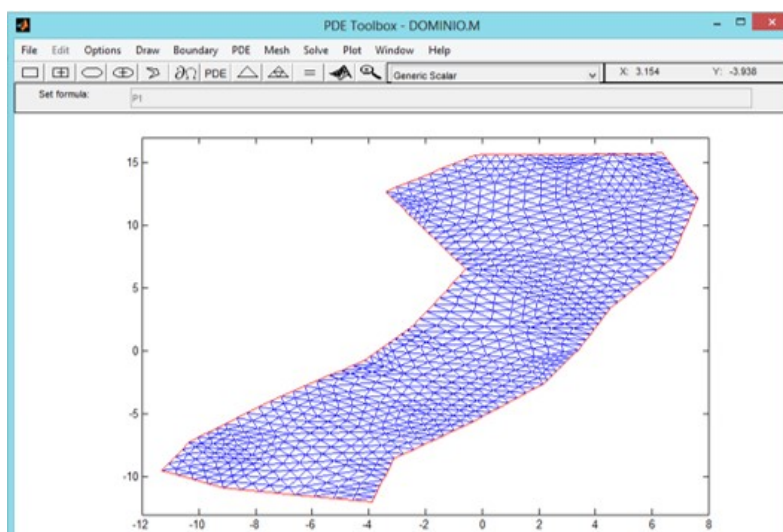


Figura 23. Mallado empleando Matlab

5.5.2 En Fream++

Previo a la resolución del problema se procedio a *generar el contorno*, para ello en un editor de texto se crea un archivo llamado *demo* para lo cual se empleo los puntos de la

tabla 9, en los que para cada par de puntos se estableció la ecuación, por ejemplo para los dos primeros puntos se tiene la siguiente ecuación:

$$\text{border } a(t=0,1)\{x = 2.759218449 - 3.023796949 * t; y = 15.6486042 - 0.040981704 * t;\};$$

En la figura 24 se presenta la descripción del contorno, mientras que en la figura 25 se muestra el contorno generado.

```
demo -CO: Bloc de notas
Archivo Edición Formato Ver Ayuda
border a(t=0,1){x=2.759218449-3.023796949*t; y=15.6486042-0.040981704*t;};
border b(t=0,1){x=-0.2645785-3.133769912*t; y=15.6076225-2.925030964*t;};
border c(t=0,1){x=-3.398348412+1.315032469*t; y=12.68259154-2.881561249*t;};
border d(t=0,1){x=-2.083315943+1.512420529*t; y=9.801030287-3.275957228*t;};
border e(t=0,1){x=-0.570895414-1.865137594*t; y=6.525073059-4.481022379*t;};
border f1(t=0,1){x=-2.436033009-1.729698091*t; y=2.04405068-2.778614775*t;};
border g1(t=0,1){x=-4.165731099-3.339289564*t; y=-0.734564095-3.2560079*t;};
border h(t=0,1){x=-7.505020663-2.848997559*t; y=-3.990571995-3.259525016*t;};
border i(t=0,1){x=-10.35401822-0.95271257*t; y=-7.250097011-2.237549631*t;};
border j(t=0,1){x=-11.30673079+2.172821042*t; y=-9.487646642-1.397930636*t;};
border k(t=0,1){x=-9.13390975+5.243508942*t; y=-10.88557728-1.088264276*t;};
border l(t=0,1){x=-3.890400809+0.781524861*t; y=-11.97384155+3.432003909*t;};
border m(t=0,1){x=-3.108875948+2.816378784*t; y=-8.541837644+2.959495357*t;};
border o(t=0,1){x=-0.292497164+2.465152044*t; y=-5.582342287+2.993139558*t;};
border p(t=0,1){x=2.17265488+1.225273922*t; y=-2.589202729+2.707861295*t;};
border q1(t=0,1){x=3.397928802+1.122343041*t; y=0.118658566+3.287621291*t;};
border r(t=0,1){x=4.520271843+2.197784828*t; y=3.406279857+4.054907352*t;};
border s(t=0,1){x=6.718056671+0.896854308*t; y=7.461187209+4.725281959*t;};
border t1(t=0,1){x=7.61491098-1.250388676*t; y=12.18646917+3.566402185*t;};
border u1(t=0,1){x=6.364522303-3.605303854*t; y=15.75287135-0.104267148*t;};
```

Figura 24. Descripción del dominio empleandoFremfee++

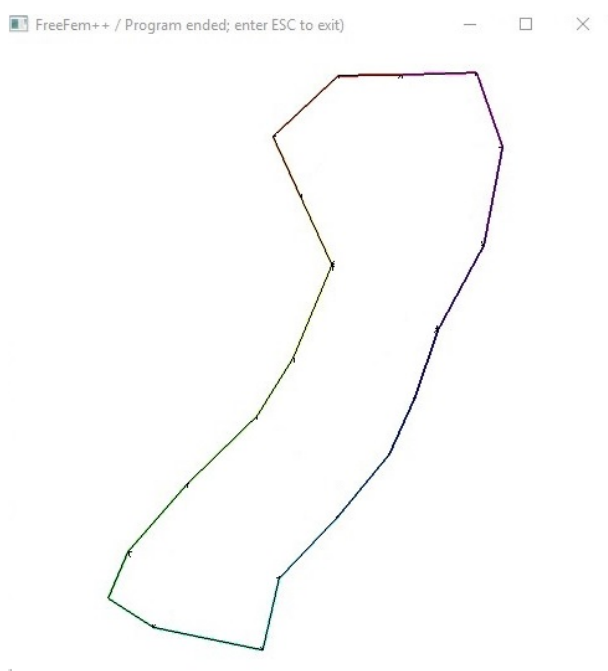


Figura 25. Representación gráfica del contorno empleando Fremfee++

- *Generación del mallado:* empleando el comando **mesh**, en este comando se debe especificar cuantos triángulos por cada lado se emplearan en la resolución mediante elementos finitos; para la resolución del presente problema se emplearon 8 triángulos por cada borde definido, al igual que se hizo en matlab, en la figura **26** se puede apreciar el mallado.

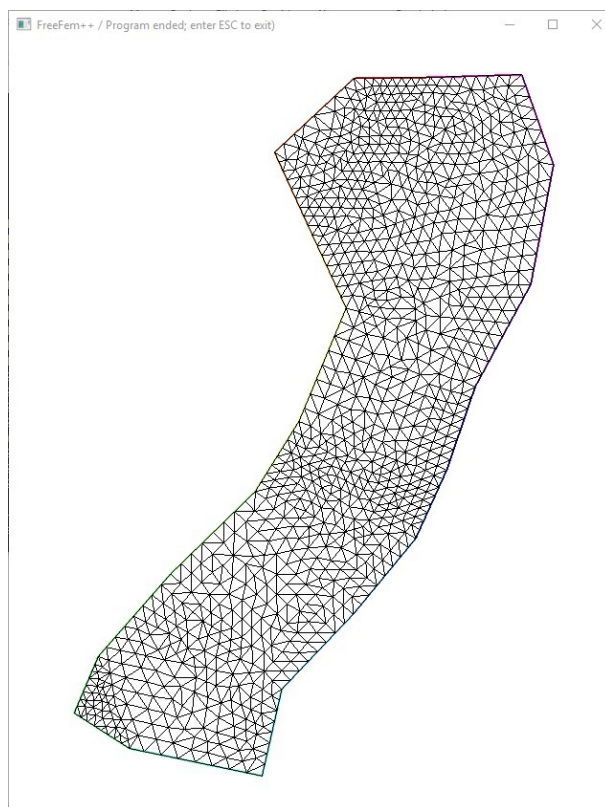


Figura 26. Mallado empleando Fremfee++

observando las figuras 21, 22, 24 y 25 se puede concluir dominio Ω generado tanto en Pdetool de matlab y Frefemm++ para el contorno y mallado son iguales, lo que significa que los procedimientos utilizados son confiables.

5.6 Simulación de la dispersión de contaminantes en el aire

La simulación se utiliza para visualizar como cambia en el tiempo y el espacio la concentración de la mezcla de una sustancia llamado contaminante con el objeto de analizar la calidad del aire.

En el presente trabajo se realiza la simulación de dos contaminantes (Dioxido de Nitrógeno y Monóxido de Carbono) para varios períodos de tiempo (1 mes, 3 meses, 6 mese, 12 meses, y 15 meses).

5.6.1 Dióxido de Nitrógeno

Usando el icono PDE, el interfaz de Matlab nos permite escoger el tipo de ecuación. Para el presente trabajo se escoge una ecuación de tipo parabólico, una vez elegido el tipo de ecuación diferencial se procede a ingresar los datos de entrada necesarios, ver figura 27

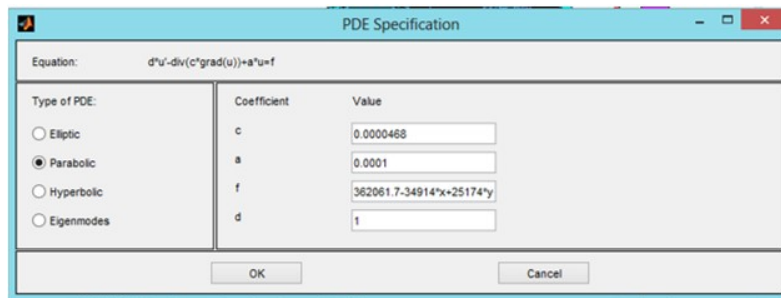


Figura 27. Ecuación de difusión-reacción

Seguidamente usando el icono SOLVE, nos permite ingresar los datos del tiempo para la simulación, ver figura 28.

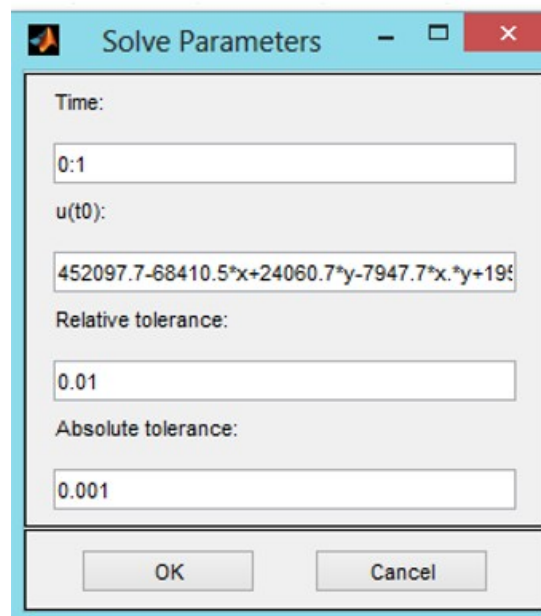


Figura 28. Ingreso de condiciones iniciales

Como se manifestó antes, dado que FremFee++ no cuenta con interfaz gráfica, el ingreso de la ecuación a resolver y los datos necesarios, se los realiza mediante código, tal como se puede apreciar en la figura 29.

```

demoNO: Bloc de notas
Archivo Edición Formato Ver Ayuda

fespace Vh(Th,P1);
Vh u,v,uu,f,g;
real dt = 0.1, D = 0.000468, q=0.001;
problem dHeat(u,v) =
int2d (Th) ( u*v + dt*D*(dx(u)*dx(v) + dy(u)*dy(v)) +dt*q*u*v)
+ int2d(Th) (- uu*v - dt*f*v )
+ on (1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20, u=g);
real t=0; // start from t=0
// condicion inicial(ecuacion de las estaciones) u(x,y,0)=0
uu=784.8-115*x+32.7*y-41.7*x*y+96.6*x*x;
for (int m=0;m<=1/dt;m++)
{
t=t+dt;
f = 60862-5869*x+42317*y-1459*x*y+798.8*x*x; //fuente (moviles)
g = 0;//condicion de borde g=0
dHeat;
//plot (u, Th, wait=1);
plot(u,ps="dHeat.eps",fill=1, value=true);
//medit("dHeat", Th, u);

uu = u;
//cout <<"t="<<t<<"L^2-Error="<<sqrt( int2d(Th)((u-t*x^4)^2) ) <<endl;
}

```

Figura 29. Ingreso de función de condiciones iniciales

A continuación se presenta la simulación para diversos períodos de tiempo seleccionados

Un mes

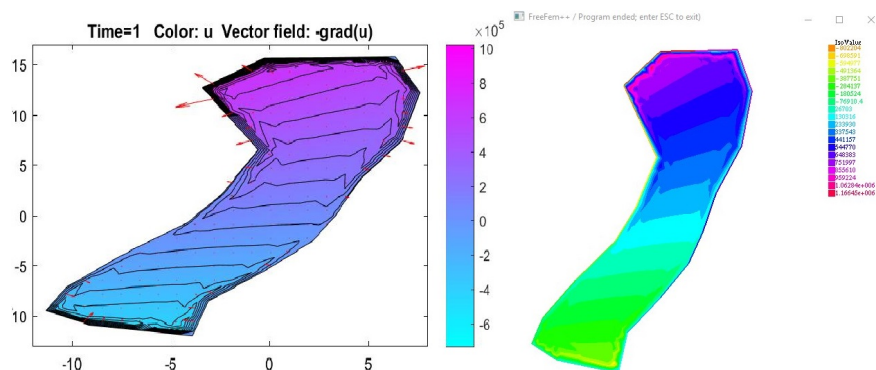


Figura 30. NO2 para 1 mes Matlab (izq.) - FremFee+ (der.)

Tres meses

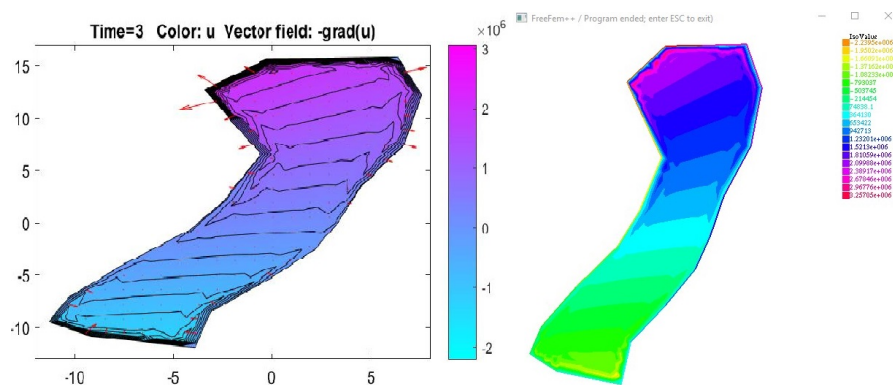


Figura 31. NO2 para 3 meses Matlab (izq.) - FremFee+ (der.)

Seis meses

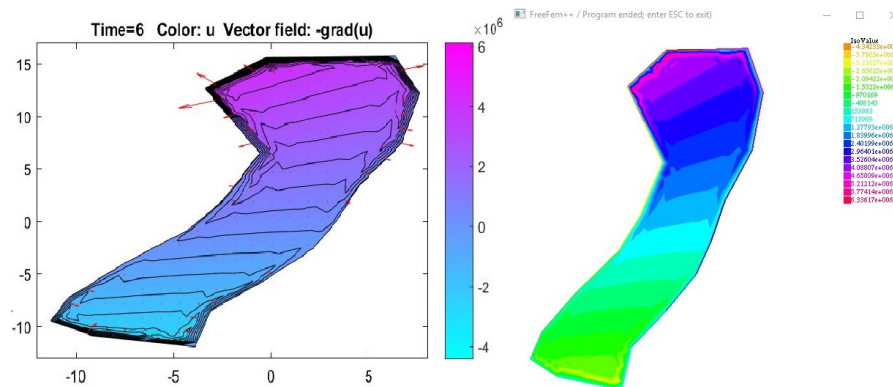


Figura 32. NO2 para 6 meses Matlab (izq.) - FremFee+ (der.)

Doce meses

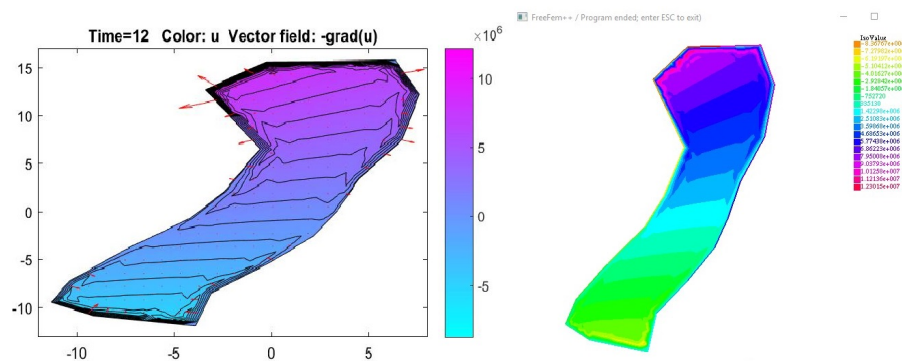


Figura 33. NO2 para 12 meses Matlab (izq.) - FremFee+ (der.)

Quince meses

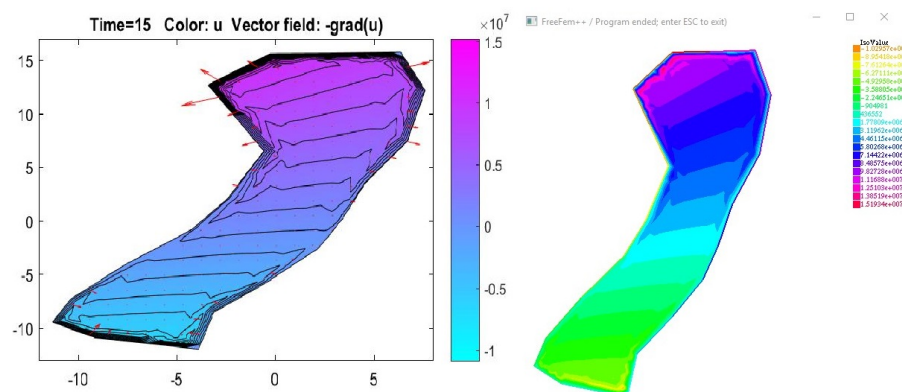


Figura 34. NO2 para 15 meses Matlab (izq.) - FremFee+ (der.)

Los resultados con los dos softwares empleados en la simulación del modelo de dispersión del NO_2 en el dominio de Ω , son iguales y en los mismos se puede distinguir tres zonas principales diferenciados por los colores violeta, azul, y verde. El área de color violeta representa una mayor concentración del contaminante debido al mayor flujo vehicular, En contraste, la zona sur del dominio delimitada de color verde representa una baja dispersión de contaminante, mientras que la zona del centro del dominio representa una mediana concentración de contaminante debido a un menor flujo vehicular que la zona norte, pero mayor que la zona sur.

5.6.2 Monóxido de Carbono

Para el caso del monóxido de carbono se procedio tal como se mostro en las figuras 27, 28 y 29 para ingresar la ecuación y las condiciones iniciales tanto en Matlab y en Fremfee++. Obteniendo los resultados que ha continuación se presentan.

Un mes

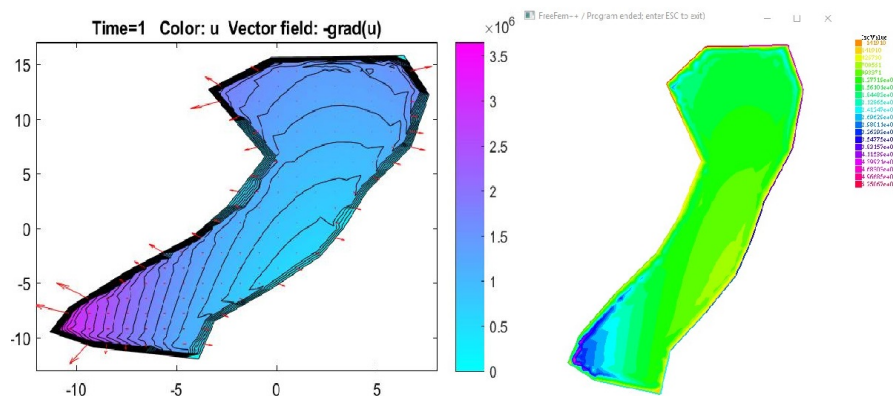


Figura 35. CO para 1 mes Matlab (izq.) - FremFee+ (der.)

Tres meses

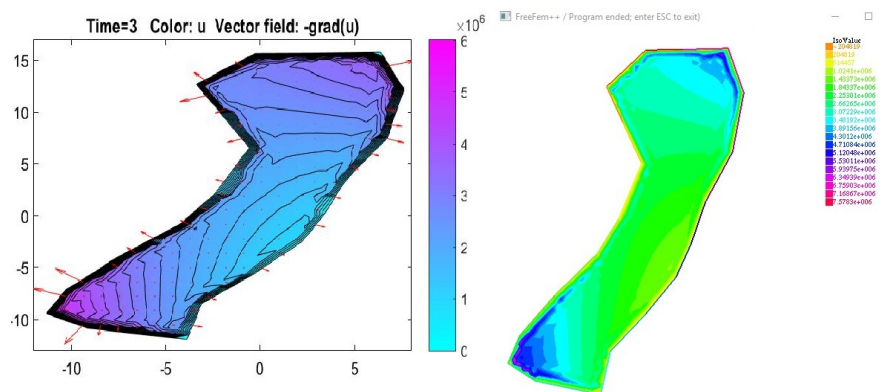


Figura 36. CO para 3 meses Matlab (izq.) - FremFee+ (der.)

Seis meses

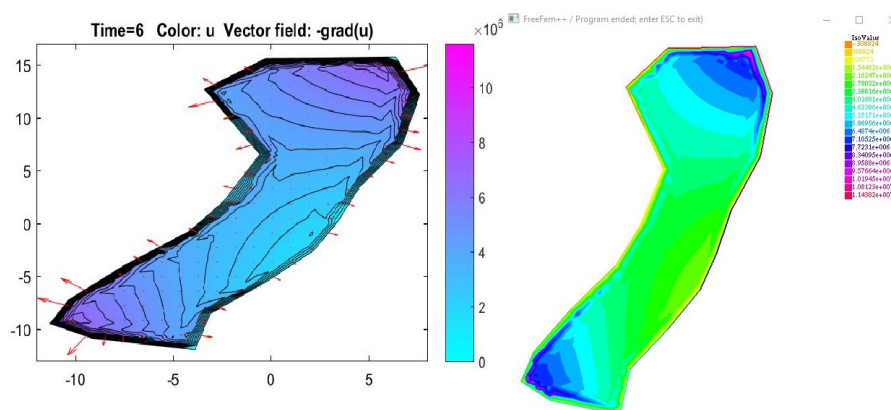


Figura 37. CO para 6 meses Matlab (izq.) - FreeFem+ (der.)

Doce meses

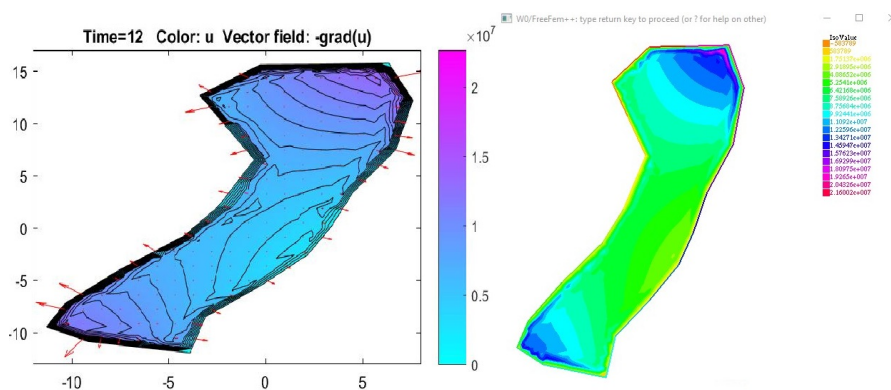


Figura 38. CO para 12 meses Matlab (izq.) - FreeFem+ (der.)

Quince meses

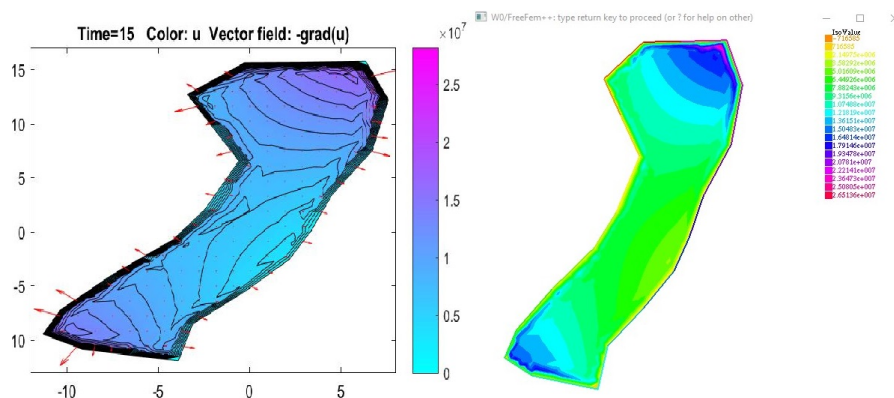


Figura 39. CO para 15 meses Matlab (izq.) - FreeFem++ (der.)

En los dos software utilizados para la simulación de la dispersión de CO en el dominio de Ω , son iguales, en la parte de color violeta existe mayor concentración del contaminante, debido a que es un lugar de mayor flujo vehicular. La parte de color azul, correspondiente al centro del dominio, la concentración del contaminante disminuye debido a que el flujo es menor. La zona de color verde corresponde a la parte sur del dominio indica que la concentración del contaminante es baja, lo que se refleja en las figuras 34 - 39.

Cabe destacar que la dispersión de los dos contaminantes estudiados es similar, debido principalmente a que están relacionados con el flujo vehicular, es decir, en zonas de mayor flujo vehicular se tiene mayor concentración de los dos contaminantes.

CAPÍTULO 6

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

6.1 Conclusiones

Se ha realizado satisfactoriamente a simulación numérica de la emisión de dos contaminantes producidas por fuentes móviles de la ciudad de Quito, mediante el modelo matemático de difusión-reacción por el método de elementos finitos para ello se ha utilizado Matlab con su herramienta Pdetool y se ha verificado los resultados con Freefem++.

Los resultados obtenidos de este estudio, permiten visualizar de una forma gráfica el comportamiento del transportan los contaminantes estudiados en la ciudad de Quito. Se observar que la del mayor dispersión se localiza en la parte norte de la ciudad, correspondiente a un de mayor flujo vehicular como es el intercambiador de Carcelén, sitio de entrada y salida de vehículos de la ciudad. Mientras que en el centro la dispersión de los dos contaminantes va disminuyendo y en la parte sur de la ciudad existe menor dispersión debido a que el flujo vehicular es menor que en el norte.

El modelo matemático de difusión-reacción funciona perfectamente en simulación del problema de contaminación atmosférica de la ciudad de Quito utilizando el método e elementos finitos.

La información recolectada en la EMOP y las estaciones de monitoreo fue suficiente para poder construir la función de condición inicial y de la fuentes de emisión respectivamente, las mismas que son utilizados como datos de entrada en la ecuación de difusión-reacción para realizar la simulación en los dos paquetes computacionales.

Al comparar las figuras de la simulación a diferentes tiempos de los contaminantes CO y NO₂ realizados en Matlab y Freefem++ se observa que las gráficas son iguales lo que permite validar los resultados obtenidos.

La contaminación atmosférica causada por fuentes móviles merece más atención por parte de las autoridades debido a que afecta a la salud de las personas y el medio ambiente.

Las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales surgen en muchos fenómenos físicos, químicos y biológicos que se producen en la naturaleza.

6.2 Recomendación.

Para darle un mayor grado de precisión a los modelo matemático se hace necesario evaluar las condiciones ambientales al interior de la ciudad como por ejemplo la velocidad

y dirección del viento, sumideros y la topografía del dominio de estudio por lo que es necesario utilizar la ecuación de convección-difusión-reacción para predecir realmente la dispersión de los contaminantes en la atmósfera.

El presente trabajo se enfocó solamente a contaminantes como CO y NO₂, por lo que hace necesario se incluyan simulaciones similares con otros contaminantes como SO₂, CO₂, HC.

Debido a la importancia del problema de contaminación atmosférica, se recomienda realizar un estudio más profundo en espacios funcionales más generales.

REFERENCIAS

- Albuja, G., & Naula, I. (2001). *Modelos Matemáticos de Contaminación del Aire*. Universidad Central del Ecuador.
- Ambientalista. (2017). *Contaminación ambiental*. <http://contaminacionambiental.net/contaminacion-ambiental/>. (Recuperado: 10/05/2017)
- Benalcázar, H. (1994). *Modelización y Simulación*. Universidad Central del Ecuador.
- Bird B, S. W., & E, L. (1973). *Fenómeno de transporte y estudio sistemático de los fundamentos del transporte de materia, energía y cantidad de movimiento*. Editorial Reverté S.A., Barcelona.
- Booth C, P. J., Beer T. (1978). *Diffusion of salt in tap water*.
- Brezis, H. (1983). *Analyse Fonctionnelle*. Masson, Paris.
- Bustos, F. (2010). *Manual de gestión y control ambiental*. Ecuador: RN Industria gráfica.
- Carasso. (1987). *Métodos numéricos para la resolución de ecuaciones en derivadas parciales*. Université Jean Monnet Saint Etienne.
- Cevallos, V. M., Díaz, V., & Sirois, C. M. (2017). Particulate matter air pollution from the city of Quito, Ecuador, activates inflammatory signaling pathways in vitro. *Innate Immunity*, 23(4), 392–400.
- Eliseo, C. (2010). *Notas sobre freefem++ 2d y 3d traducción del manual de f. hecht*.
- EPA. (2017). *Environmental Protection Agency, Environmental Topics*. <https://www.epa.gov/environmental-topics>. (Recuperado: 15/06/2017)
- Evans, L. (1998). *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society.
- García, D. (2012). *Modelado numérico de la dispersión de contaminantes asociada al flujo atmosférico dentro de un entorno urbano específico de la ciudad de Bogotá*. Universidad Nacional de Colombia.
- Gómez, J. (2006). *Análisis Funcional y Optimización*. Universidad de Chile.
- Guadalupe, J. (2016). *Modelación de emisiones contaminantes de fuentes móviles terrestres en Quito, Ecuador*. Universidad Técnica Federico Santa María.
- Guanche, A. (2013). *Las propiedades del aire*. <http://contaminacionambiental.net/contaminacion-ambiental/>. (Recuperado: 18/05/2017)

- Lazaro, C. (1999). *Aplicaciones de método de elementos finitos a problemas de termofluidos*. Tesis de Maestro, Universidad Autónoma de Nuevo León, San Nicolás de la Garza NL.
- Marinoschi, G. (2012). *Functional Approach to Nonlinear Models of Water Flow in Soils*. Institute of Mathematical Statistics, Romanian Academy Bucharest.
- Mathwork. (2017). *Partial Differential Equation Toolbox*. <https://es.mathworks.com/products/pde/features.html>. (Recuperado: 02/01/2018)
- Ministerio de Ambiente. (2011). *Acuerdo Ministerial n 50: Norma Ecuatoriana de Calidad de Aire*. <http://www.ambiente.gob.ec/wp-content/uploads/downloads/2012/10/Acuerdo-50-NCA.pdf>. (Recuperado: 10/05/2017)
- Molina, P. (2013). *Simulación numérica de un problema de contaminación atmosférica*. Universidad Politécnica de Madrid.
- OMS. (2016). *Organización Mundial de la Salud, calidad del aire ambiente (exterior) y salud*. <http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs313/es/>. (Recuperado: 01/08/2017)
- Onate, E., & Zárate, F. (2013). *The Finite Element Method: Its Basic and Fundamentals*. McGraw-Hill, Londres.
- Organización Mundial de la Salud. (2005). *Guía de la calidad del aire de la OMS relativas a material particulado, ozono, dióxido de nitrógeno y el dióxido de azufre*.
- Oyarzún, R. (2007). Transporte de contaminantes en aguas subterráneas. *CEAZA, Chile*, http://www.aulados.net/Temas_ambientales/Contaminantes_aguas_subterraneas/Transporte_contaminantes.pdf.
- Romero, S., Moreno, F. J., & Rodríguez, I. M. (2001). *Introducción a las Ecuaciones en Derivadas Parciales*. Huelva, Servicio de Publicaciones. Universidad de Huelva.
- Sayas, F. (2007). *Modelos matemáticos en mecánica*. España: Departamento de Matemática Aplicada, Universidad de Zaragoza.
- Secretaria Ambiente. (2017). *Informe de la calidad de aire 2016*. www.quitoambiente.gob.ec. (Recuperado: 20/06/2017)
- Taylor, M. (2013). *Partial differential equations ii: Qualitative studies of linear equations*

(Vol. 116). Springer Science & Business Media.