SELECCIONES MATEMÁTICAS
Universidad Nacional de Trujillo
http://revistas.unitru.edu.pe/index.php/SSMM
Vol. 03(02): 5-9 (2016)
ISSN: 2411-1783 (versión electrónica)

ANÁLISIS NUMÉRICO DE UN PROBLEMA INVERSO ORIGINADO EN EL FENÓMENO DE CONTAMINACIÓN AÉREA URBANA

NUMERICAL ANALYSIS OF AN INVERSE PROBLEM ORIGINATED IN PHENOMENON OF POLLUTION AIR URBAN

ANíBAL CORONEL* AND IAN HESS**

Received, Jul. 17, 2016. Accepted, Nov. 11, 2016.

Resumen

En este trabajo se presenta el estudio de calibración de un modelo matemático bidimensional para el problema de contaminación aérea urbana. Se asume principalmente que la contaminación aérea es afectada por la convección del viento, la difusión y las reacciones químicas de los contaminantes. En consecuencia se obtiene, de manera natural, como problema directo una ecuación de convección-difusión-reacción. En el problema inverso se analiza la determinación de la difusión, asumiendo que se tiene una observación de los contaminantes en un tiempo finito. Para resolverlo numericamente se utiliza el método de volúmenes finitos, se considera como función costo la de minimos cuadrados y se calcula el gradiente con el método de sensitividad.

Palabras claves. Problema de Poincare-Perron, comportamiento asintótico, ecuación tipo Riccati.

Abstract

This paper presents the calibration study of a two - dimensional mathematical model for the problem of urban air pollution. It is mainly assumed that air pollution is affected by wind convection, diffusion and chemical reactions of pollutants. Consequently, a convection-diffusion-reaction equation is obtained as a direct problem. In the inverse problem, the determination of the diffusion is analyzed, assuming that one has an observation of the pollutants in a finite time. To solve it numerically the finite volume method is used, the least squares function is considered as cost function and the gradient is calculated with the sensitivity method.

Keywords. Poincaré-Perron problem; asymptotic behavior; Riccati type equations

1. Introduction. En los útimos años se ha generado un gran impulso de los métodos matemáticos aplicados a diversos fenómenos naturales y sociales. Entre estos se pueden señalar el gran desarrollo alcanzado por la biomatemática, la dinámica de fluidos, el control automático de la ecología y la meteorología. Particularmente, esta última ciencia ha recibido mucha contribución desde el punto de vista matemático, al formular modelos fundamentados en la teoría de dinámica de fluidos (ver [11] y referencias citadas en este libro).

La vida urbana en las ciudades densamente pobladas, ha sido afectada por la contaminación aérea, producto de la emisión de gases en lo que actualmente se conoce como **smog**. Ahora para estudiar este problema, desde el punto de vista matemático se ha recurrido a los fundamentos teóricos desarrollados por la teoría atmosférica, la mecánica de fluidos y la química. En efecto, a continuación se recuerdan algunos aspectos de estas teorías.

Históricamente, la teoría atmosférica se remonta a los griegos, dado que alrededor del año 460 antes de Cristo, fue la primera vez que se registra la medida de la velocidad de los vientos. En

*GMA, Departamento de Ciencias Básicas, Universidad del Bío-Bío, Chile, (acoronel@ubiobio.cl, ihess@alumnos.ubiobio.cl).

este mismo hecho se realiza la elaboración de instrumentos que eran capaces de medir la fuerza y dirección de los vientos. A partir de este punto histórico no se reportan grandes hitos hasta el 1450, año en el cual el matemático italiano Leone Battista Alberti desarrolló el primer aerómetro que consistía de una placa en forma de disco perpendicular al viento. Este instrumento fue utilizado para medir la velocidad del viento basado en el ángulo entre el disco, su posición original y la posición de desplazamiento. Posteriormente en 1667 Robert Hooke desarrolló un dispositivo similar, que consistía de una hoja de metal colgada verticalmente. En 1846, el físico irlandés John Thomas Romney Robinson, inventó un aerómetro que consistía de cuatro copas hemisféricas montadas en un eje vertical. En 1892, William Henry Davies inventó un nuevo aerómetro que mide la presión a partir de la diferencia de presiones que ocurren por el viento que ingresa directamente en el tubo y la que ingresa por los costados, estableciendo que la diferencia de presiones es proporcional al cuadrado de la velocidad del viento.

Otra contribución importante a la meteorología, es la elaboración de barómetros para medir la presión. En este sentido el punto inicial fue dado por Evangelista Torricelli en el año 1643, quién construyó un barómetro basado en una columna de mercurio. El descubrimiento importante dado por Torricelli, fue que el cambio en la altura del mercurio depositado en la columna es debido al cambio de la presión atmosférica.

Por otro lado, probablemente en una tercera contribución de relevancia a la meteorología, se encuentra el descubrimiento del termoscopio desarrollado por Galileo Galilei alrededor del año 1600. Este instrumento fue desarrollado para estimar la temperatura en base a la expansión del aire. El instrumento no tenía una escala y no era confiable, sin embargo, combinado con las ideas de Torricelli condujo al descubrimiento del termómetro en el siglo XVII impulsado por el alemán Gabriel Daniel Fahrenheit y el sueco Anders Celsius.

El primer teórico de la meteorología fue Aristóteles quien explicó la causa de los vientos, las nubes, la lluvia, entre otros fenómenos meteorológicos. A partir de las contribuciones teóricas de Aristóteles la ciencia meteorológica recibió los impulsos señalados anteriormente en el descubrimiento de los instrumentos, sin embargo, se puede señalar que otro de los científicos que contribuyó al estudio del clima fue Lewis Fry Richardson, a quien se debe el uso de ecuaciones para describir el clima y lo utilizó en la segunda década del siglo XX. Es debido también a Richardson la idea de utilizar métodos numéricos para resolver las ecuaciones diferenciales que sirven de modelos básicos en la meteorología. Posterior a los trabajos de Richardson hay un vacío que fue retomado por John Von Neumann alrededor del año 1946, quien aprovechó los incipientes inicios de la era digital para perfeccionar las ideas originales de Richardson. El hito desarrollado bajo la dirección de Neumann es el primer computador que predice el clima basado en información experimental y métodos numéricos.

A partir de inicios del siglo XX y mayormente con el desarrollo industrial, los interéses de los meteorólogos y de científicos de áreas afines se vieron incentivados por un fenómeno llamado contaminación del aire o contaminación atmosférica. Es claro que este fenómeno siempre estuvo presente desde inicios de la historia de la tierra, pero con la ayuda del conocimiento científico, la humanidad se dio cuenta que una contaminación atmosférica desmesurada conllevaría a la destrucción del planeta. En consecuencia, esto originó el estudio del fenómeno de contaminación.

Algunos puntos importantes en el estudio de la contaminación son los siguientes. En 1905 Harold Antoine Des Voeux, describió la combinación de humo y neblina en varias ciudades de Gran Bretaña. En 1947 se creó un control de contaminación del aire en Los Angeles, imponiendo varias restricciones de comportamiento urbano, además, a partir de ese año varias ciudades densamente pobladas en todo el mundo comenzaron a tratar el tema que actualmente es conocido como **smog**. Actualmente este tema es tratado a niveles legislativos como un tema de salud pública, sin embargo, no existe aún una teoría suficientemente desarrollada que pueda sugerir tomar acciones que controlen el problema sin afectar el normal funcionamiento de las urbes. Por ejemplo, varias ciudades han optado por restricciones vehiculares, el establecimiento de zonas industriales alejado de las poblaciones humanas, etc. En este punto es donde se manifiesta la necesidad de un desarrollo tecnológico avanzado como por ejemplo el invento de filtros, la generación de energía limpia, etc. Una de las primeras aproximaciones al problema del smog en las ciudades se hizo desde el punto de vista químico en los laboratorios. Un marcado desarrollo de este enfoque se encuentra en los diversos trabajos de la época del año 1950 y que estudian los problemas del smog en Londres. La contribución importante de este tipo de trabajos es que permitió comprender las diferentes reacciones químicas que ocurren en la contaminación aérea y lo peligroso que esto puede ser para el hábitat humano. En particular este desarrollo asociado con el desarrollo computacional implicaron la creación de modelos matemáticos que permiten la simulación numérica.

Actualmente existen diversos tipos de modelos matemáticos para la contaminación aérea. La mayor parte de estos modelos esta basado en ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales, y en general la incógnita principal es la concentración del contaminante o contaminantes. En términos generales se puede decir que estos modelos matemáticos son elaborados para simular la concentración en el tiempo de un cierto contaminante y la forma de las ecuaciones es consecuencia de las hipótesis realizadas con respecto a las reacciones químicas.

En este trabajo el modelo matemático que se estudia es una ecuación diferencial parcial de tipo convección-reacción-difusión y se destacan fundamentalmente tres tipos de interés en su estudio: a) un buen planteamiento matemático, b) el estudio numérico y c) la calibración del modelo en términos de información de las estaciones de monitoreo.

2. Problema directo e inverso.

2.1. Problema directo (Modelo Matemático). Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ una región limitada de $\mathbb{R}^n$ ($n = 2$ ó $n = 3$) con frontera suficientemente suave denotada $\partial\Omega$. Además se denota por $\mathbf{n}$ la normal de $\partial\Omega$. Ahora, siguiendo la metodología estándar de la mecánica de fluidos, se puede establecer un modelo matemático basado en ecuaciones diferenciales parciales ver [9, 10, 12, 13, 14, 15, 16] para mayores detalles. En efecto, aplicando el balance de masa en un contaminante químico, y tomando en consideración el transporte (convección), difusión y reacción, implican que la concentración $u = u(\mathbf{x}, t)$ de contaminante gaseoso debe satisfacer una ecuación diferencial del siguiente tipo:

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial u}{\partial t} + \operatorname{div}(v\, u) = \operatorname{div}(d\,\operatorname{grad}(u)) - ku, & \text{si } (\mathbf{x}, t) \in Q_T = \Omega \times [0, T], \\[2ex]
\dfrac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}, t) = 0, & \text{si } (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times [0, T], \\[2ex]
u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}), & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega,
\end{cases}
\tag{2.1}
$$

donde v es la velocidad con viento, d es el coeficiente de difusión y k es el coeficiente de absorción.

En este trabajo se supone que la velocidad del viento es independiente de la concentración del contaminante. Así mismo, se asume que d depende solamente de la posición espacial y k es una constante positiva. Esta simplificación es debido a que el interés fundamental del trabajo es enfocado en el problema inverso de calibración del modelo. Es conveniente notar que apesar de las simplificaciones este modelo es válido en situaciones reales de contaminación en áreas urbanas [4, 9].

2.2. Problema inverso (Problema de calibración). Algunos de los parámetros o datos en el modelo (2.1), pueden ser obtenidos por mediciones físicas, en este grupo se encuentran por ejemplo la velocidad del viento y la condición inicial. Sin embargo, otros parámetros, por ejemplo d y k deben ser estimados o identificados a partir de observaciones. En este sentido se define matemáticamente un problema de calibración del modelo matemático. Este problema es formulado de la siguiente manera:

$$
\begin{cases}
\text{Dada una función de observación } u^{obs}(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega, \text{ y en un tiempo } T \text{ (fijo),} \\
\text{encontrar } d \text{ y } k \text{ de tal modo que la solución } u(\mathbf{x}, t) \text{ del problema (2.1) sea} \\
\text{lo más cercana posible de } u^{obs}(\mathbf{x}).
\end{cases}
\tag{2.2}
$$

La función u^{obs} en la práctica es obtenida vía experimentación (en el caso de laboratorio) o vía las estaciones de monitoreo en casos reales.

Para analizar y resolver el problema inverso (2.2), hay que resolver el siguiente problema de optimización:

$$
\min_{d,k} J(d, k) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \| u(\mathbf{x}, t) - u^{obs}(\mathbf{x}) \|^2 d\mathbf{x},
\tag{2.3}
$$

sujeto a que u sea solución de (2.1).

Este problema inverso ha sido estudiado de manera preliminar para el caso el cual k y d son constantes, por Omatu y Matumoto [13, 14]. Además, considerando datos reales se obtuvieron algunos resultados en [9]. También, utilizando optimización vectorial hay resultados como el representado en [5]. En esta trabajo se estudia la identificación de los parámetros en el coeficiente de difusión, asumiendo que tenga la siguiente forma polinómica:

$$d(\mathbf{x}) = \theta_{0,0} + \sum_{j=1}^{m-1} \theta_{j,0} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \theta_{j,i})^{j+1}$$

y se identifican los parámetros $\theta_{i,j}$.

3. Principales resultados. En esta sección se listan las principales conclusiones del análisis, para detalles extensos consulte [8].

3.1. Buen planetamiento de (2.1)**.** El problema directo es analizado en el contecto de soluciones débiles en espacios de Sobolev. Se demuestra que el problema (2.1) es bien puesto en el sentido de Hadamard.

3.2. Existencia de soluciones de (2.2)**.** La existencia de soluciones para (2.2) es una consecuencia de la dependencia continua de la soulución de (2.1) con respecto a los coeficientes. En efecto, este hecho implica que la función costo definida en (2.3) sea continua y en consecuencia asegurar la existencia de soluciones sobre conjuntos compactos.

3.3. Solución Numérica. La aproximación numérica para tratar el problema inverso es siguiendo la metodología dada en [7]. Es conveniente notar que al hacer uso de la formulación como problema de optimización, la aproximación numérica natural de la solución del problema inverso es la aplicación de métodos provenientes de la optimización numérica tales como: gradiente, Newton y cuasi-Newton. En todas estas técnicas, el paso fundamental es el cálculo numérico del gradiente. Dicho cálculo no es una tarea sencilla. Siguiendo las ideas de la teoría del control óptimo, se tienen al menos dos maneras para el cálculo del gradiente: la introducción de una ecuación adjunta y mediante la definición de un sistema de sensibilidad. En la presente trabajo se optó por el *sistema de ecuaciones de sensibilidad*. Para ser más presisos la discretización de (2.1) se desarrolló mediante un esquema de volumenes finitos siguiendo las ideas de Afif y Amaziane [1, 2, 3]. Luego, la discretización de (2.2) se realiza mediante el método del gradiente conjugado, donde el gradiente es calculado via una ecuación de sensitiviad discreta.

Agradecimientos. . Los autores agradecen el soporte financiero de los proyectos de investigación DIUBB GI 153209/C y DIUBB GI 152920/EF financiados por la Universidad del Bío-Bío, Chile. Ian Hess el soporte fianciero a la beca de apoyo para la participación en eventos extrangeros otorgada por la Dirección General de Posgrado de la Universidad del Bío-Bío, Chile.

Referencias

[1] M. Afif, ; B. Amaziane, *Convergence of finite volume schemes for a degenerate convection-diffusion equation arising in flow in porous media.* Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 191 (2002), no. 46, 5265–5286.

[2] M. Afif, ; B. Amaziane, *Numerical simulation of two-phase flow through heterogeneous porous media.* International Conference on Numerical Algorithms, Vol. II (Marrakesh, 2001). Numer. Algorithms 34 (2003), no. 2-4, 117–125.

[3] M. Afif and B. Amazine, *On the convergence of finite volume schemes for one-dimensional two-phase flow in porous media.* J. Comput. Appl. Math., 145 (2002), pp. 31-48.

[4] I. Allegrini, F. De Santis, *Urban air pollution: monitoring and control strategies,* Volume 8 of NATO ASI series: Environment, Springer-Verlag, 1996

[5] L. J. Alvarez-Vázquez, ; N. García-Chan; A. Martínez; M. E. Vázquez-Méndez, *An application of interactive multi-criteria optimization to air pollution control.* Optimization 64(6), (2015), 1367–1380.

[6] R. Bürger , A. Coronel and M. Sepúlveda, *A semi-implicit monotone difference scheme for an initial-boundary value problem of a strongly degenerate parabolic equation modelling sedimentation-consolidation processes* Math. Comp., 75 (2006), 91-112.

[7] R. Bürger, A. Coronel and M. Sepúlveda, *A numerical descent method for an Inverse problem of a scalar conservation law modelling sedimentation* Numerical Mathematics and Advanced Applications: Proceedings ENUMATH 2007 (K. Kunish, G. Of and O. Steinbach, eds.), pp. 225-232, Springer Verlag, 2008.

[8] I. Hess, Análisis numérico de un problema inverso originado en el fenómeno de contaminación aérea urbana, *Tesis de magister*, Universidad del Bío-Bío, Chile, 2016

[9] P. Holnicki, A. Kaluszko, M. Kurowski, R. Ostrowski, and A. Zochowski. An urban-scale computer model for short-term prediction of air pollution. Archiwum Automatyki i Telemechaniki, XXXI(1-2):51–71, 1986.

[10] S. Ikeda; Y. Nakamori; Y. Sawaragi. *A measure of obtaining representative pointwise source and its availability for air pollution control.* Internat. J. Systems Sci. 8(12), (1977), 1429–1440.
[11] M. Z. Jacobson. Fundamentals of Atmospheric Modeling. Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
[12] S. Omatu and K. Matumoto. *Distributed parameter identification by regularization and its application to prediction of air pollution.* Inter- national Journal of Systems Science, 22(10):2001–2012, 1991.
[13] S. Omatu and K. Matumoto. *Parameter identification for distributed systems and its application to air pollution estimation.* International Journal of Systems Science, 22(10):1993–2000, 1991.
[14] S. Omatu and J. H. Seinfeld. Distributed Parameter Systems: Theory and Applications. Oxford Mathematical Monographs. Oxford University Press, New York, 1989.
[15] M. Oprea. *A case study of knowledge modelling in an air pollution control decision support system.* AI Commun. 18(4), (2005), 293–303.
[16] A.I.F Vaz; E. C. Ferreira. *Air pollution control with semi-infinite programming.* Appl. Math. Model. 33(4), (2009), 1957–1969.