

# APROXIMACIÓN AL ESTUDIO DE LA CALIDAD DEL AIRE: UN MODELO MATEMÁTICO

## APPROACH TO STUDY AIR QUALITY: MATHEMATICAL MODEL

WILMAR DÍAZ O.<sup>1</sup>  
HAROLD VACCA<sup>2</sup>  
ÁLVARO H. SALAS<sup>3</sup>

### RESUMEN

Los modelos de calidad del aire están definidos para predecir y simular las concentraciones de contaminantes del aire en un cierto periodo de tiempo. Las predicciones surgidas de los modelos suelen ser usadas por las industrias para controlar sus niveles de emisión. Los datos de entrada para los modelos de calidad de aire son abundantes y engloban varias condiciones ambientales: velocidad del aire, turbulencia, temperatura, densidad. Por ello, se utilizan condiciones ideales sobre la atmosfera, así como las reacciones químicas propias que subyacen al contaminante. Este artículo trata sobre tal modelación, considerando los fenómenos de advección y de difusión durante el transporte del contaminante. Luego, se formula una relación de las variables con una ecuación en derivadas parciales, parabólica, de advección-difusión:  $\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}(Uc) = k \frac{\partial^2 c}{\partial t^2}$ , que los acopla. Para este problema de valor inicial se establecen soluciones exactas-suaves para  $t > 0$ , aun si los datos iniciales son discontinuos; y numéricas, basadas en diferencias divididas. Las soluciones son simuladas a través de Matlab® y FlexPDE®.

### Palabras clave

Calidad del aire, transporte, advección, difusión, problema de valor inicial, simulación.

### Abstract

The arisen predictions of patterns are usually used in the industry to control their emission levels. The entrance data for the models of quality

- 
- 1 Licenciado en matemáticas. M.Sc. (c) en Matemática Aplicada. Investigador grupo SciBas. Docente Facultad Tecnológica, Universidad Distrital Francisco José de Caldas. Correo: wadiaz@gmail.com
  - 2 Licenciado en matemáticas. M.Sc. (c) Matemática Aplicada. Investigador grupo SciBas. Docente Facultad Tecnológica, Universidad Distrital Francisco José de Caldas. Correo: hvacca@udistrital.edu.co
  - 3 Matemático. M.Sc. Matemática Aplicada. Docente Universidad de Caldas, Universidad Nacional de Colombia. Correo: asalash2002@yahoo.com

of air are abundant and they include several environmental conditions: speed of the air, turbulence, temperature, density. This article regards the model of the quality of the air, considering advection and diffusion phenomena during the transport of a pollutant. Then, a relationship of the variables is formulated with an PDE, equation parabolic  $\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}(Uc) = k \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$  advection-diffusion that couples them. For this initial-value problem down-smooth exact solutions are established, even if the initial data are discontinuous – through substitution and the method of separation of variables; and also numeric, based on divided differences. Conditions are assumed ideal on the atmosphere, as well as the chemical reactions that underlie the interior of the pollutant. The solutions are simulated through Matlab and FlexPDE.

### Key words

Quality of the air, transport, advection, diffusion, problem of initial value, simulation.

## 1. CONTEXTO

Entre los siglos XIV y XVII, la humanidad hizo la transición desde el oscurantismo y el miedo, hasta la verdad y el conocimiento. Este periodo, conocido como Renacimiento, fue un movimiento que sembró oportunamente las semillas de la ciencia y de la revolución industrial. Con el tiempo, los seres humanos habían aprendido a transformar el ambiente para satisfacer sus necesidades, al contrario que en las edades oscuras, cuando ellos siempre se sometieron a la naturaleza. La naturaleza, desde entonces, se trató como un artículo en el nuevo mundo industrializado. Iniciaba el debate intenso sobre la ética medioambiental. En el siglo XX se profundizaba la degradación del medioambiente como resultado de la desenfrenada e irresponsable industrialización. La polución del aire había empezado a afectar el ecosistema y, por consiguiente, la vida humana normal.

Al examinar la atmósfera, se encuentra que el aire tiene rastros de gas, anhídrido carbónico y vapor (ver, por ejemplo [3]). En ausencia de estas moléculas se absorbe fuertemente el infrarrojo, por lo que la temperatura de la superficie podría volverse, aproximadamente, cuarenta veces más fría de lo que hoy es. Por otra parte (ver [38]), si los niveles de contaminación, calidad del aire, en los que ciertas sustancias (monóxido de carbono, óxidos de nitrógeno, óxidos de azufre, compuestos orgánicos volátiles, ozono) alcanzan concentraciones lo suficientemente elevadas sobre su nivel normal, como para ser una amenaza, que es desgraciadamente la tendencia, la destrucción de la vida puede volverse una realidad por el denominado calentamiento global.

De acuerdo con lo anterior, la intervención humana para lograr un medio ambiente ecológico saludable no debe considerar, exclusivamente, metas a corto plazo. Por ello, las predicciones de largo plazo son necesarias a fin de evaluar los métodos que nosotros usamos para enajenar la energía. Una valoración comprensiva del problema requiere una modelación que incorpore la mayor cantidad posible de variables.

## 2. INTRODUCCIÓN

La modelación, que constituye un método para recolectar, tratar y utilizar información sobre el mundo, es un proceso en el que un objeto de estudio es reemplazado por otro, que cumple unas condiciones de analogía con relación al primero. Trabajar con el modelo y no con su original ofrece la ventaja de que, en forma segura y rápida, permite estudiar las propiedades del objeto en cualquier situación imaginable, ver figura 1. La modelación matemática del presente artículo, entonces, consistió en el reemplazo de la calidad del aire por su imagen matemática.



Figura 1. Estructura de modelación matemática de la calidad del aire.

El modelo matemático propuesto estudia un sistema de múltiples componentes que involucra la simulación del transporte de un contaminante en el ambiente, emitido por fuentes estacionarias, como las plantas industriales; y/o móviles, como los vehículos. En él se integran: la velocidad del aire y su dirección; la cantidad de turbulencia atmosférica; los parámetros de las emisiones; la fuente y su altura; la velocidad de salida, la temperatura de la salida y la proporción de masa; las elevaciones de terreno de la fuente y la situación del receptor; el coeficiente de difusión; el tiempo; la distancia, las cinéticas de reacción; y las fuentes o sumideros de la sustancia.

Las entradas del modelo son las fuentes y sumideros de la sustancia. Como se realizan seguimientos de las variaciones temporales del proceso en estudio, entonces este es un modelo dinámico (no estacionario). Por esta razón, se hace uso de las leyes de conservación de masa, momento, energía e información en un volumen de control, cuyos operadores deben contener derivadas parciales, pues ellas representan sistemas multivariados que experimentan cambios en más de una dimensión, precisamente lo que ocurre al simular el transporte de contaminante en la atmósfera. El componente de gradiente explica el fenómeno de advección del contaminante, mientras que el de divergencia explica los fenómenos de difusión. Para la solución del modelo matemático, se estipulan las condicio-

nes iniciales y de frontera; así se garantizan la existencia y unicidad de la solución del modelo. Debido a la presencia de un operador distribuido (derivadas parciales), se consideran ambos tipos de condición.

La deducción y descripción matemática del transporte atmosférico, la difusión y la reacción química de los contaminantes tienen múltiples objetivos, entre otros, la capacidad de predecir cómo cambian las concentraciones máximas de contaminantes en respuesta a las transformaciones previstas en la meteorología y en la fuente de contaminación. Este artículo se refiere al modelado del transporte y la difusión de una sola especie (contaminante), idealizando procesos subyacentes tales como las características geográficas del terreno, las condiciones meteorológicas y las reacciones químicas que se producen en la especie. Las aproximaciones utilizadas se enumeran a continuación:

1. Fuente de emisión constante.
2. Existencia de un flujo y de condiciones meteorológicas constantes.
3. Conservación de la densidad de la especie.
4. Transporte constante en dirección horizontal.
5. Se ignoran los cambios de la velocidad del viento con la altura.
6. Se asume que los contaminantes son transportados en línea recta, de forma instantánea, hasta el receptor.
7. No se tiene en cuenta las transformaciones químicas.

Finalmente, en este caso, la consideración de la concentración del contaminante, en función de la distancia de la fuente de emisión y el tiempo

de desplazamiento, proporcionará información para saber si dichas cantidades son admisibles. Y, bajo el modelamiento del problema de valor

inicial de advección-difusión, podemos aproximarnos a la realidad de la problemática y, por tanto, a su solución (ver Figura 2).

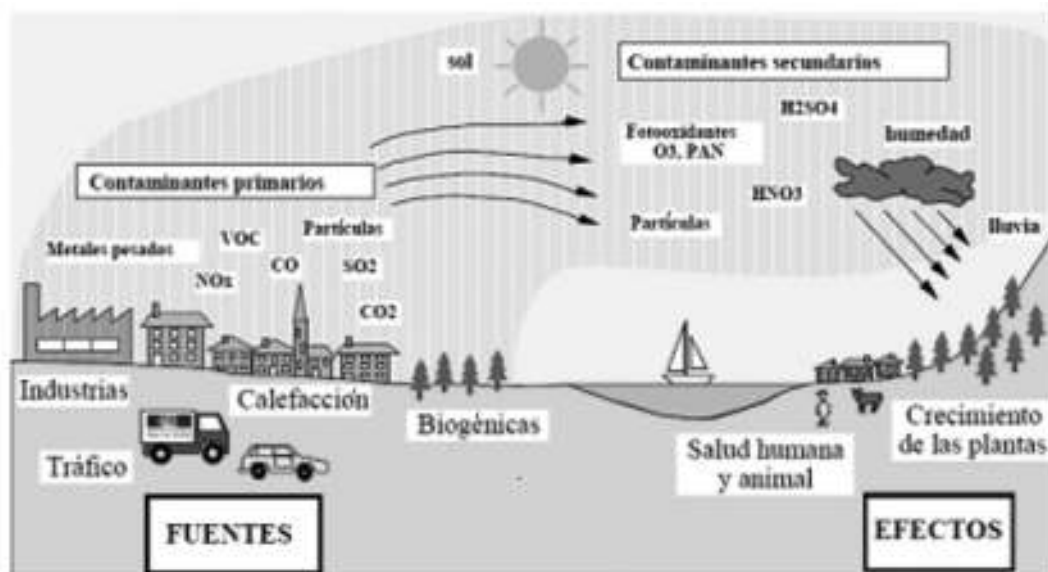


Figura 2. Contaminantes del aire: fuentes y efectos.  
Fuente: proyecto “Modelo de calidad el aire para Bogotá”, Universidad de los Andes.

### 3. MODELO ADVECTIVO

Iniciamos la formulación del modelo teniendo en cuenta solamente el fenómeno de advección. Consideremos en primer lugar la situación en una dimensión donde hay advección pero no difusión. Supongamos que en un tiempo  $t = 0$  la densidad de los gases tiene una distribución como la mostrada en la Figura 3, que está dada por  $c_0(x)$ .



Figura 3. Distribución de la concentración.

Supongamos que este perfil se mueve hacia la derecha por la acción del viento con una velocidad constante  $U$ . Así, obtenemos el movimiento del contaminante:

$$c(x, t) = c_0(x - Ut) \quad (1)$$

Derivando parcialmente tenemos:

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial x} = c_0'(x - Ut) ; \quad \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = -c_0'(x - Ut) U \quad (2)$$

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial c(x, t)}{\partial x}(-U), \quad \frac{\partial c(x, t)}{\partial t} + U \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} = 0 \quad (3)$$

De aquí resulta la ecuación de advección pura:

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + U \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} = 0 \quad (4)$$

con la condición inicial  $c(x,0) = c_0(x)$  (5)

La solución se obtiene utilizando el método de las características (ver [5], [13], [14], [15], [17], [18], [19] y [24]). Se tiene que:

$$U = \frac{dx}{dt} \rightarrow x = Ut - x_0 \quad (6)$$

Y al hacer el cambio de variable  $\xi = x - Ut$  se obtiene:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial t} \rightarrow \frac{dc}{dt} = \frac{\partial c}{\partial x} U + \frac{\partial c}{\partial t} \quad (7)$$

Al sumar las ecuaciones 4 y 7 se llega a:

$$\frac{dc}{dt}(\xi t) = 0 \quad (8)$$

donde  $\xi = x - Ut$  (9)

En la ecuación 8 podemos observar que  $c$  es independiente del tiempo, y por lo tanto su solución es de la forma:  $c(\xi, t) = c_0(\xi)$ , y deshaciendo el cambio de variable se tiene que :

$$c(x,t) = c_0(x - Ut) \quad (10)$$

Para que el problema quede bien determinado, basta con dar la condición inicial:

$$c(x,0) = c(x) = c_0(Ut - x), \text{ en } t = 0 \quad (11)$$

Para hallar el valor de  $c$  en un punto  $(x,t)$  de interés, es suficiente con cortar la recta  $\xi = x - Ut$  que pasa por ese punto con el eje  $x$ .

La deducción de la ecuación 4 puede realizarse también como sigue (ver [5], [21], [22] y [24]):

$c(x,t)$ : Concentración del contaminante en el punto  $x$  en el instante  $t$ .

$\varphi(x,t)$ : Flujo del contaminante que pasa por el punto  $x$  en el instante  $t$ .

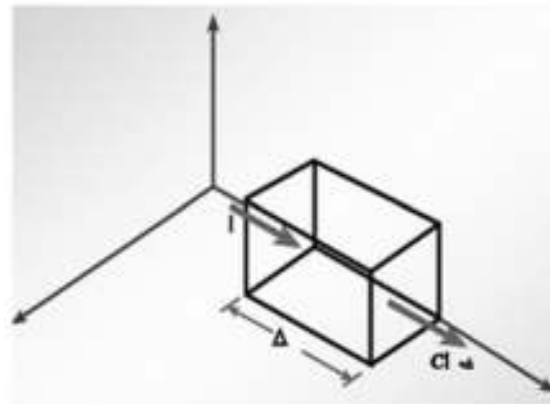


Figura 4. Porción de contaminante.

La concentración del contaminante en el intervalo  $[x, x + \Delta x]$  es:

$$\int_x^{x+\Delta x} c(x,t) dx \quad (12)$$

Luego, la razón de cambio de la concentración de contaminante en el intervalo  $[x, x + \Delta x]$  es:

$$\frac{d}{dt} \left( \int_x^{x+\Delta x} c(x,t) dx \right) = \int_x^{x+\Delta x} \frac{\partial c(x,t)}{\partial t} dx = \varphi(x,t) - \varphi(x + \Delta x, t) \quad (13)$$

Asociada a las fuentes y/o sumideros dentro en el intervalo  $[x, x + \Delta x]$  se tiene:

$f(x,t)$ : rata de la densidad lineal de flujo de la concentración

El flujo de contaminante en el intervalo  $[x, x + \Delta x]$ , producido por las fuentes y/o sumideros dentro es:

$$\int_x^{x+\Delta x} f(x,t)dx \quad (14)$$

Por el principio de conservación de la masa:

$$\frac{d}{dt} \left( \int_x^{x+\Delta x} c(x,t)dx \right) = \int_x^{x+\Delta x} \frac{\partial c(x,t)}{\partial t} dx = \varphi(x,t) - \varphi(x + \Delta x, t) + \int_x^{x+\Delta x} f(x,t)dx \quad (15)$$

Aplicando el teorema del valor medio para integrales, se llega a:

$$\frac{\partial c(\xi_i, t)}{\partial t} \Delta x = [\varphi(x,t) - \varphi(x + \Delta x, t) + f(\xi_i)\Delta x], \quad \text{con } x < \xi_i < x + \Delta x \quad (16)$$

O, lo que es equivalente:

$$\frac{\partial c(\xi_i, t)}{\partial t} = \left\{ \frac{\varphi(x,t) - \varphi(x + \Delta x, t)}{\Delta x} \right\} + f(\xi_i) \quad (17)$$

Tomando  $\lim_{\Delta x \rightarrow 0}$  se obtiene finalmente:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} + f \Rightarrow \frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial c}{\partial x} + f \quad (18)$$

Haciendo  $\varphi(x,t) = u(x,t)c$ , y,  $f = 0$ , se obtiene

la ecuación de advección pura:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -U \frac{\partial c}{\partial x} \quad (19)$$

Si  $U$  es constante,  $\varphi(x,t) = -k \frac{\partial c(x,t)}{\partial x}$  (20)

#### 4. MODELO DIFUSIVO

El otro proceso que intervine es el de la *difusión*, encargado de que, incluso sin la presencia del viento, hasta los malos olores desaparezcan después de un tiempo.

Consideramos  $c$  la concentración de una especie como una función de posición  $(x_1, x_2, x_3)$  y de tiempo  $t$  que va a ser transportada por la acción del viento, con una velocidad  $u = u(x_1, x_2, x_3, t)$  que asumimos como conocida. Partículas de la especie también son difundidas localmente, y tienden a moverse desde áreas de alta concentración hacia áreas de baja concentración. Si se ignora la difusión, la ecuación de transporte es:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (uc) = 0 \quad (21)$$

Si integramos sobre cualquier dominio limitado  $D$  en  $\mathbb{R}^3$  obtenemos:

$$\frac{d}{dt} \iiint_D c(x_1, x_2, x_3, t) dx_1 dx_2 dx_3 = - \iint_{\partial D} cu \cdot n ds \quad (22)$$

$\partial D$  es la frontera de  $D$  y  $n$  es el vector normal unitario exterior a  $\partial D$ . Esta ecuación dice que la tasa de aumento del contaminante en cualquier dominio  $D$  es igual al flujo de contaminante ha-

cia la frontera. Si la difusión no se ignora, entonces la ecuación 21 se transforma en:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (uc) = \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (k_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j}) \quad (23)$$

Donde  $k_{ij}$  es una matriz positiva llamada *matriz de difusión*. Tanto en la ecuación 21 como en la 23, conocemos la concentración  $c$  en un tiempo inicial ( $t = 0$ ) y el objetivo es calcular la concentración en los tiempos siguientes. En particular, queremos averiguar los valores máximos de la concentración en un tiempo prescrito. Ahora añadimos la difusión a la ecuación de advección (4):

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(Uc) = k \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} (k > 0) \quad (24)$$

La condición inicial es:

La ecuación 24 se puede simplificar si usamos el cambio de variable:

$$c(x, 0) = c_0(x) (-\infty < x < \infty) \quad (25)$$

$$c_t = -\beta e^{\alpha x - \beta t} W + e^{\alpha x - \beta t} W_t = e^{\alpha x - \beta t} (-\beta W + W_t)$$

$$c_x = \alpha e^{\alpha x - \beta t} W + e^{\alpha x - \beta t} W_x = e^{\alpha x - \beta t} (\alpha W + W_x)$$

$$c_{xx} = e^{\alpha x - \beta t} (\alpha^2 W + \alpha W_x + \alpha W_x + W_{xx}) =$$

$$e^{\alpha x - \beta t} (\alpha^2 W + 2\alpha W_x + W_{xx})$$

Reemplazando  $c_t$ ,  $c_x$  y  $c_{xx}$  en la ecuación (7) obtenemos:

$$\begin{aligned} e^{\alpha x - \beta t} (-\beta W + W_t) + U[e^{\alpha x - \beta t} (\alpha W + W_x)] &= \\ k[e^{\alpha x - \beta t} (\alpha^2 W + 2\alpha W_x + W_{xx})] & \\ -\beta W + W_t + U(\alpha W + W_x) &= k(\alpha^2 W + 2\alpha W_x + W_{xx}) \\ W_t &= (k\alpha^2 + \beta - U\alpha)W + (2k\alpha - U)W_x + kW_{xx} \\ W_t &= (k \frac{U^2}{4k^2} + \frac{U^2}{4k} - U \frac{U}{2k})W + (U - U)W_x + kW_{xx} \\ W_t &= kW_{xx} \end{aligned} \quad (26)$$

Como  $c(x, 0) = c_0(x)$ , entonces  $c_0(x) = W(x, 0)e^{\alpha x}$ , donde  $W(x, 0) = c_0(x)e^{-\alpha x}$ .

Así, transformamos la ecuación 24 en un problema de difusión de calor con condición inicial:

$$\begin{cases} W_t = kW_{xx}, -\infty < x < \infty \\ W(x, 0) = c_0(x)e^{-\alpha x} \end{cases} \quad t > 0 \quad (27)$$

### 5. SOLUCIÓN DEL MODELO DE ADVECCIÓN-DIFUSIÓN

Resolvemos la ecuación (27), separando variables (ver la técnica en [33], [34] o [36]) haciendo  $W(x, t) = X(x)T(t)$ :

$$X'' + \lambda X = 0, \quad T' + \lambda k T = 0 \quad (28)$$

La solución para  $X$  produce valores propios  $\lambda = w^2$  para  $w \geq 0$  funciones propias de la forma:

$$a_w \cos(wx) + b_w \text{sen}(wx) \quad (29)$$

La solución para  $T$  es  $T' + w^2 T = 0$ , cuya solución general es  $e^{-w^2 kt}$ .

Así, para  $w \geq 0$ , tenemos:

$$W_w(x, t) = [a_w \cos(wx) + b_w \text{sen}(wx)]e^{-w^2 kt} \quad (30)$$

Para satisfacer la condición inicial, hacemos una superposición de estas funciones, sobre todo  $w \geq 0$ , que toma la forma de una integral:

$$W(x, t) = \int_0^\infty [a_w \cos(wx) + b_w \text{sen}(wx)]e^{-w^2 kt} dw \quad (31)$$

Y necesitamos que:

$$W(x, 0) = \int_0^\infty [a_w \cos(wx) + b_w \text{sen}(wx)]dw = c_0(x) \quad (32)$$

Esta es la integral de Fourier de  $c_0(x)$  en la recta real, que nos lleva a elegir los coeficientes:

$$a_w = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty f(\xi) \cos(w\xi) d\xi \quad \text{y} \quad b_w = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty f(\xi) \sin(w\xi) d\xi \quad (33)$$

La integral en (31) podemos escribirla como:

$$W(x, t) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \cos(w(\xi - x)) f(\xi) e^{-w^2 kt} d\xi dw \quad (34)$$

Como el integrando es una función par en  $w$ , entonces  $\int_0^\infty \dots dw = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty \dots dw$  (35)

Con lo cual, la solución podemos escribirla como:

$$W(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \cos(w(\xi - x)) f(\xi) e^{-w^2 kt} d\xi dw \quad (36)$$

Pero como

$$\int_{-\infty}^\infty e^{-w^2 kt} \cos(w(\xi - x)) f(\xi) dw = \frac{\sqrt{\pi}}{kt} e^{-(x-\xi)^2/4kt} \quad (37)$$

la ecuación 36 queda :

$$W(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{\sqrt{\pi}}{kt} e^{-(x-\xi)^2/4kt} \cos(w(\xi - x)) f(\xi) d\xi$$

Que al simplificar:

$$W(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi kt}} \int_{-\infty}^\infty e^{-(x-\xi)^2/4kt} f(\xi) d\xi \quad (38)$$

El problema planteado en (27) puede resolverse usando la fórmula anterior. Así, la solución del problema de valor inicial (ver [27], [29], [30] o [31]):

$$\begin{cases} c_t + U c_x = k c_{xx} \\ c(x, 0) = c_0(x) \end{cases}, \quad (-\infty < x < \infty) \quad (39)$$

es:  $c(x, t) = \frac{e^{\frac{U}{2k}x - (\frac{U^2}{4k})t}}{2\sqrt{\pi kt}} \int_{-\infty}^\infty e^{-(x-\xi)^2/4kt} f(\xi) e^{-\frac{U}{2k}\xi} d\xi \quad (40)$

Aquí,  $f$  corresponde a una función dada. Si, por ejemplo,  $f(\xi) = \text{Sen}(\xi)$ ,  $U = 1$  (velocidad del aire), y  $k = 1$ . Se tiene la siguiente solución, simulada en MatLab (ver [32], [33] y [35]):

$$c(x, t) = \frac{e^{\frac{1}{2}x - \frac{1}{4}t}}{2\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^\infty e^{-(x-\xi)^2/4t} e^{-\frac{1}{2}\xi} \text{sen}(\xi) d\xi \quad (41)$$



mostrada en la Figura 5.

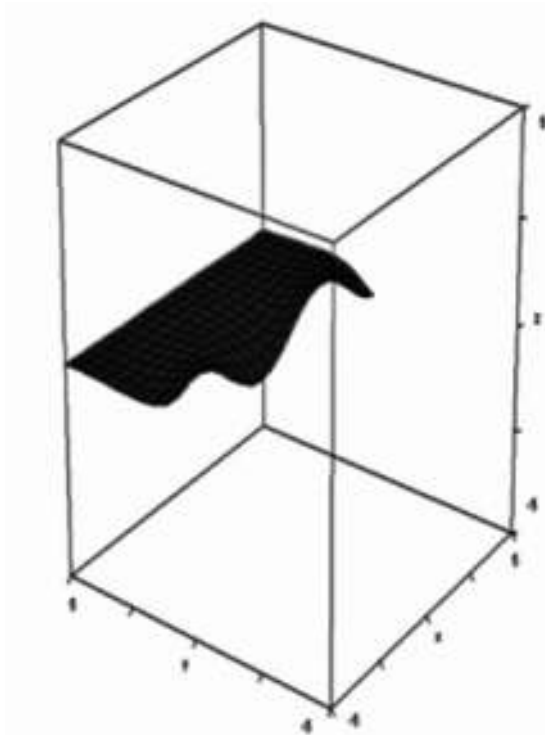


Figura 5. Simulación de la solución  $f(\xi) = \text{Sen}(\xi)$ ,  $U = 1$ , utilizando MatLab®.

### 6. MÉTODOS NUMÉRICOS

En la ecuación  $\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(Uc) = k \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ , con  $k > 0$ , podemos aproximar su solución utilizando el esquema de elementos finitos. Se aproxima  $\frac{\partial c}{\partial t}$ ,  $\frac{\partial}{\partial x}(Uc)$  y  $k \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$ , a través del siguiente esquema, entre muchos otros que pueden verse en [2], [6], [7], [9], [11], [14], [16], [20], [23], [24], [26]:

$$c_j^{n+1} - \frac{U\Delta t}{\Delta x}(c_j^n - c_{j-1}^n) + k \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}(c_{j+1}^n - 2c_j^n + c_{j-1}^n) \quad (42)$$

La implementación se realiza de dos formas, utilizando FlexPDE, versión académica 6.14. Este

software (ver [4] y [39]) fue desarrollado para solucionar numéricamente sistemas de ecuaciones diferenciales parciales de primer o segundo orden; lineales y/o no lineales para 1D, 2D o 3D; con geometría cartesiana, esférica o cilíndrica. Los sistemas desarrollados pueden ser representados por valores iniciales y de frontera en estado estacionario, dependientes del tiempo o de eigenvalores. La cantidad de ecuaciones a resolver está limitada sólo por la capacidad del computador. Maneja un entorno gráfico amigable, la elaboración del algoritmo en forma de "Script" es sencilla, pues posee una estructura básica, a manera de plantilla, para la construcción de los modelos, estructurada por secciones, y cada una de ellas está identificada por encabezados.

Un primer código muestra la superficie solución (ver Figura 6). La malla de elementos finitos se encuentra en la Figura 7.

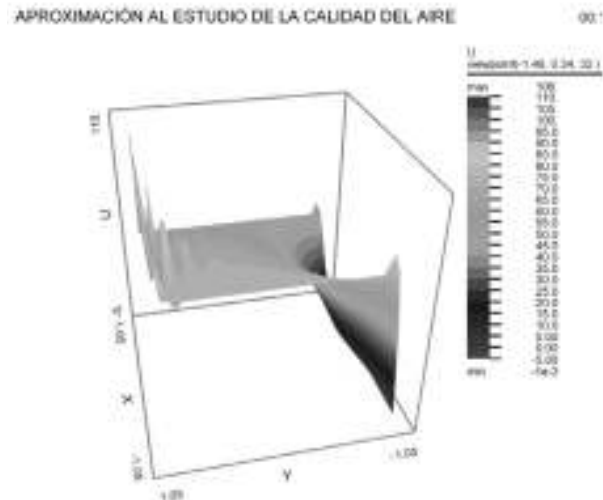


Figura 6. Superficie solución.

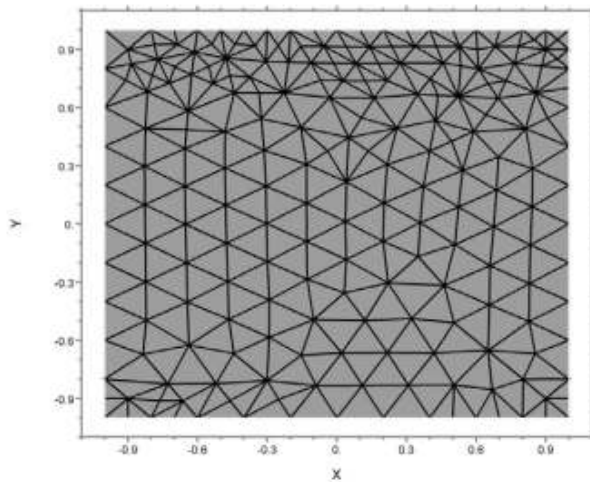


Figura 7. Malla de elementos finitos.

El segundo código, muestra en la Figura 8, un corte en la dirección 1-2 de la superficie. En la Figura 9, un histórico muestra de modo gráfico el valor de  $u$  en cada uno de los puntos 0 a 10 a través del tiempo.

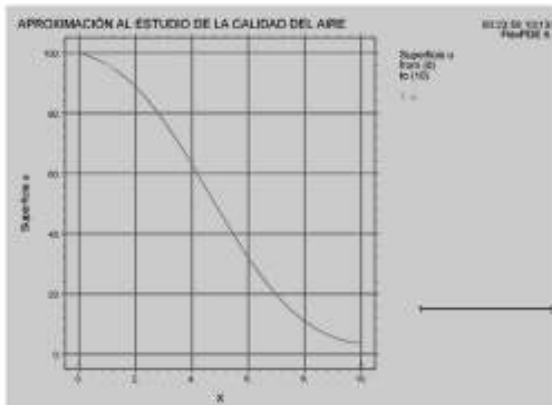


Figura 8. Corte sobre la superficie solución.

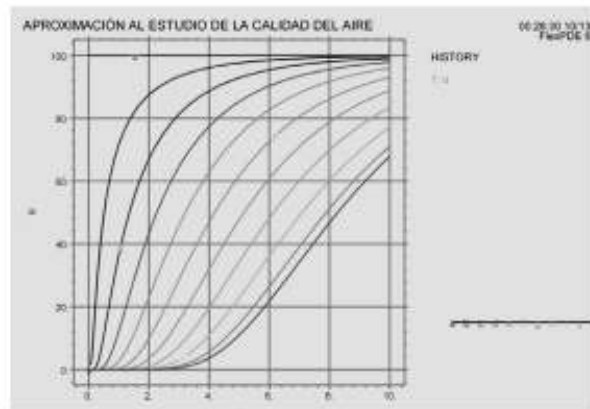


Figura 9. Histórico de las soluciones de  $t = 0$ , hasta  $t = 10$ .

## 7. CONCLUSIONES

- El modelo de calidad del aire está sujeto a múltiples variables entre las cuales está la distancia y el tiempo de transporte; Puede expresarse en la ecuación de advección-difusión. Su solución determina la concentración del contaminante y el modelo puede solucionarse con solución exacta y aproximada.
- Se logra condensar la temática de la advección-difusión, incluyendo técnicas propias de las ecuaciones en derivadas parciales, como las características, la separación de variables y los esquemas numéricos.
- Una sustitución apropiada reduce el problema de la solución a uno conocido, el esquema de separación de variables, muy eficaz para llegar a establecer una solución exacta.
- El esquema de diferencias está implementado en los diferentes programas que solucionan ecuaciones en derivadas parciales. Sin embargo, tienen dificultad en la representación.

- FlexPDE es una herramienta ligera pero poderosa para simular las soluciones (ver [4] y [39]).
- Resulta útil para la convergencia de la solución, el teorema de representación de Lax, que indica que, *dados un problema de valor inicial apropiadamente puesto y una aproximación en diferencias finitas a este que satisface un criterio de consistencia, la estabilidad es una condición necesaria y suficiente para la convergencia* (ver [14], [21] y [22]).
- Para medir la estabilidad de la solución de la ecuación de advección-difusión, es útil el criterio de estabilidad de Neumann, basado en las series de Fourier, herramienta muy familiar en ingeniería (ver [10], [12], [22], [24] y [25]).

## REFERENCIAS

- [1] E. Domínguez, *Introducción a la modelación matemática*. Bogotá: Universidad Javeriana, 2007. Disponible en <http://matmodelling.google.com>
- [2] A. Lora, *Solución de la ecuación de advección-difusión por el método de diferencias finitas para el estudio de la propagación de un contaminante en la atmósfera*. Barranquilla: Universidad del Atlántico, 1999.
- [3] A. Srivastava, *Stabilized explicit time integration for parallel air quality models*. Blacksburg, Virginia: Polytechnic Institute and State University, 2006.
- [4] R. Barrera et al., *Software FLEX PDE*. Medellín: Posgrado en Ingeniería, Universidad de Antioquia, 2006.
- [5] W. Hundsdorfer y J. G. Verwer, *Numerical solution of time-dependent advection-diffusion-reaction equations*. Nueva York: Springer, 2003.
- [6] W. F. Ames, *Numerical methods for partial differential equations*. Nueva York: Academic Press, 1977.
- [7] U. M. Ascher, *Numerical methods for evolutionary differential equations*. Filadelfia: Siam, 2008.
- [8] R. Courant, "Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations". *Bull. Amer. Math. Soc.*, vol. 49, pp. 1-23, 1943.
- [9] B. A. Finlayson, *Numerical methods for problems with moving fronts*. Seattle, Ravenna: Park Publishing, Inc., 1992.
- [10] C. A. J. Fletcher, *Computational galerkin methods*. Nueva York: Springer-Verlag, 1984.
- [11] G. E. Forsythe y W. R. Wasow, *Finite difference methods for partial differential equations*. Nueva York: Wiley, 1960.
- [12] Ch. Grossmann y H. G. Roos, *Numerik Partieller Differentialgleichungen*. Stuttgart: Teubner Studienbücher, 1994.
- [13] W. Hackbusch, *Elliptic differential equations: Theory and numerical treatment*. Berlín: Springer-Verlag, 1992.
- [14] A. Iserles, *A first course in the numerical analysis of differential equations*. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.
- [15] F. John, *Partial differential equations*. Nueva York: Springer-Verlag, 1982.

- [16] L. Lapidus y G. F. Pinder, *Numerical solution of partial differential equations in science and engineering*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- [17] R.J. LeVeque, *Numerical methods for conservation laws*. Birkhäuser Basel, Suiza: Ed. Verlag, 1999.
- [18] R.J. LeVeque, *Finite volume methods for hyperbolic problems*. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.
- [19] A. R. Mitchell, *Computational methods in partial differential equations*. Londres: John Wiley & Sons, 1977.
- [20] A. R. Mitchell y D. F. Griffiths, *The finite difference method in partial differential equations*. Nueva York: Wiley-Interscience, 1980.
- [21] K. W. Morton y D. F. Mayers, *Numerical solution of partial differential equations*. Cambridge: Cambridge University Press, 1994.
- [22] R. Peyret & T.D. Taylor, *Computational methods for fluidflow*. 3ª ed. Berlín-Heidelberg-Nueva York: Springer-Verlag, 1990.
- [23] A. Quarteroni & A. Valli, *Numerical approximation of partial differential equations*. Berlín: Springer-Verlag, 1994.
- [24] R. D. Richtmeyer y K. W. Morton, *Difference methods for initial-value problems*. Nueva York: Interscience Publishers, 1967.
- [25] A. A. Samarskij, *Theorie der Differenzenverfahren*. Leipzig: Geest & Portig, 1984.
- [26] W. E. Schiesser, *The numerical method of lines, integration of partial differential equations*. San Diego: Academic Press, 1991.
- [27] G. D. Smith, *Numerical solution of partial differential equations*. Oxford: Oxford University Press, 1985.
- [28] G. A. Sod, *Numerical methods in fluid dynamics*. Cambridge: Cambridge University Press, 1985.
- [29] J. C. Strikwerda, *Finite difference schemes and partial differential equations*. Pacific Grove: Wadsworth & Brooks, 1989.
- [30] J. W. Thomas, *Numerical partial differential equations: Finite difference methods*. Nueva York: Springer-Verlag, Texts in Applied Mathematics 22, 1998.
- [31] J. W. Thomas, *Numerical partial differential equations: Conservation laws and elliptic equations*. Nueva York: Springer-Verlag, 1999.
- [32] L. N. Trefethen, *Spectral methods in Matlab*. Filadelfia: Siam, 2000.
- [33] Burden, R. Et al, *Análisis numérico*. Mexico D.F: Thomson Learning, 2002
- [34] Harrel, E. Et al, *Linear Methods of Applied Mathematics*, 1996. Disponible en: <http://www.mathphysics.com/pde/HEderiv.html>
- [35] Mathews, J. et al., *Métodos numéricos con Matlab*. Madrid: Prentice Hall, 1999.
- [36] Myint-U, T. *Partial differential equations o mathematical physics*. Nueva York: Elsevier North-Holland, 1978.
- [37] Smith, G. *Numerical Solution of partial differential equations: Finite difference methods*. Nueva York: Oxford University Press, 1999.

- [38] N, Rojas, *Aire y problemas ambientales de Bogotá*. Bogotá: Universidad Nacional de Colombia. Versión en PDF.
- [39] C, Sepúlveda. et al. *Presentación software flexpde*. Medellín: Universidad de Antioquia, 2007.