

# ESTIMACIÓN DE LA TASA DE EMISIÓN DE UNA FUENTE CONTAMINANTE: ANÁLISIS DE LAS SOLUCIONES OBTENIDAS CON DIFERENTES TIPOS DE DATOS.

David Parra-Guevara <sup>1\*</sup>, Yuri Skiba <sup>2</sup> y Francisco Javier Bustamante-García <sup>3</sup>.

<sup>123</sup>Centro de Ciencias de la Atmósfera, Universidad Nacional Autónoma de México.

<sup>3</sup>Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, CDMX, C. P. 04510, México.

Recibido XX; aceptado XX

## Abstract

In this work, an inverse method to estimate the emission rate of a non-stationary point source that emits a pollutant into the atmosphere is presented. The method is formulated as a variational problem (Tikhonov-type regularization). Numerical examples of the emission rate estimation are analyzed using a one-dimensional version of the dispersion model. The inverse method can be applied both for a time series of the concentration of an atmospheric pollutant, that is, data collected in a monitoring station, as well as for concentration data distributed in a domain at a fixed time. The method estimates are different for these data sets. Satisfactory results are obtained in the recovery of the emission rate using time series, while the spatially distributed data are not viable to solve the inverse problem.

## Resumen

En este trabajo se presenta un método inverso para estimar la tasa de emisión de una fuente puntual no-estacionaria que emite un contaminante hacia la atmósfera. El método se formula como un problema variacional (regularización tipo Tikhonov). Se analizan ejemplos numéricos de la estimación de la tasa de emisión utilizando una versión unidimensional del modelo de dispersión. El método inverso se puede aplicar tanto para una serie de tiempo de la concentración de un contaminante atmosférico, es decir, datos recabados en una estación de monitoreo, como para datos de la concentración distribuidos en un dominio a un tiempo fijo. Las estimaciones del método son diferentes con respecto a estos conjuntos de datos. Se obtienen resultados satisfactorios en la recuperación de la tasa de emisión usando series de tiempo, mientras que los datos espacialmente distribuidos no son viables para resolver el problema inverso.

**Key words:** air pollution, inverse problem, regularization, direct model, adjoint model.

**Palabras clave:** contaminación del aire, problema inverso, regularización, modelo directo, modelo adjunto.

## I. INTRODUCCIÓN

En forma general, los problemas inversos consisten en la determinación de las causas a partir del conocimiento de los efectos en un sistema (modelo). Siendo los efectos los valores observados de las variables de estado, y las causas las condiciones iniciales, forzamientos o valores de parámetros que tienen la capacidad de conducir al sistema hasta dicho comportamiento. De esta forma, cada problema inverso corresponde a un problema directo, siendo estos últimos aquellos problemas donde para un conjunto de causas conocidas se pronostican los efectos en un sistema.

Una característica significativa es que, aún cuando los problemas directos están bien formulados, los problemas inversos correspondientes caen frecuentemente en el campo de los problemas mal formulados, es decir, son problemas que presentan diferentes tipos de inestabilidad, o no satisfacen la existencia o la unicidad de la solución (Aster *et al.*, 2013). De esta forma, la determinación de una solución en un problema inverso requiere, además de la comprensión del problema directo (sistema), la introducción de métodos capaces de atenuar el proceso de inestabilidad para así poder seleccionar una solución congruente con el fenómeno en estudio. Dichos métodos se conocen como *regularizaciones del problema inverso* (Aster *et al.*, 2013). Entre tales métodos son importantes aquellos introducidos por Tikhonov (Tikhonov and Arsenin, 1977), los cuales consisten en la minimización de un funcional que agrupa el error en los datos, y alguna norma para las variables de control y sus derivadas (Aster *et al.*, 2013; Tikhonov and Arsenin, 1977).

\*Autor para correspondencia: pdavid@atmosfera.unam.mx.

Entre las técnicas de modelación inversa también destacan aquellas basadas en el uso de las funciones adjuntas y un principio de dualidad. La estimación dual usa la solución del modelo adjunto como núcleo en una ecuación integral, y tiene la ventaja de presentar en forma explícita la influencia que las condiciones iniciales y los forzamientos tienen sobre las variables de estado del sistema (Skiba and Parra-Guevara, 2015).

En este trabajo se aplica esta técnica, junto con una regularización del tipo Tijonov, para obtener la solución de un problema inverso en el contexto de la estimación de fuentes contaminantes. El problema por tratar consiste en la recuperación de la tasa de emisión no-estacionaria de una fuente puntual desconocida a partir de los datos de concentración en algunos sitios de monitoreo (series de tiempo o datos espacialmente distribuidos). La solución de este problema inverso permite estimar y verificar inventarios de emisiones de diversas sustancias tóxicas de origen químico o biológico, así como para detectar la intensidad y ubicación de fuentes desconocidas que emiten contaminantes atmosféricos (Skiba and Parra-Guevara, 2015; Vautard *et al.*, 2000). El objetivo del trabajo es estudiar el desempeño de la regularización del problema inverso cuando diferentes conjuntos de datos sintéticos son utilizados (series de tiempo y datos espacialmente distribuidos). Dicho análisis permite determinar el tipo de información que es más adecuada para lograr una buena recuperación de la tasa de emisión de una fuente desconocida.

## II. MODELOS Y REGULARIZACIÓN DEL PROBLEMA INVERSO

En esta sección se considera el siguiente modelo de difusión-reacción de dimensión uno para describir la concentración del contaminante  $\phi = \phi(x, t)$ , (Skiba and Parra-Guevara, 2015),

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \sigma \phi = Q(t) \delta(x - x_0), \quad 0 < x < \ell, \quad 0 < t < T, \quad (1)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial x}(0, t) = 0, \quad t > 0, \quad (2)$$

$$\mu \frac{\partial \phi}{\partial x}(\ell, t) = -\zeta \phi(\ell, t), \quad t > 0, \quad (3)$$

$$\phi(x, 0) = 0, \quad 0 < x < \ell. \quad (4)$$

En la ecuación (1),  $\sigma > 0$  representa el coeficiente de transformación del contaminante,  $\mu > 0$  es el coeficiente de difusión y  $x_0$  denota el sitio de la fuente puntual en el dominio  $D = (0, \ell)$  con tasa de emisión desconocida  $Q(t)$ . La condición de frontera (2) significa que no hay flujo del contaminante a través de  $x = 0$ , es decir, en esta parte la frontera está cerrada. La condición (3) significa que en  $x = \ell$  la frontera está abierta, y el flujo del contaminante es proporcional a la concentración  $\phi$ , donde el coeficiente de proporcionalidad es  $\zeta > 0$ . En consecuencia, la masa del contaminante en el dominio  $D$  se incrementa debido a la tasa de emisión  $Q$ , y decrece a causa del flujo de salida por el punto frontera  $x = \ell$  y a la transformación química. Es decir, el modelo (1)-(4) satisface la siguiente *ecuación de balance de masa*:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^\ell \phi(x, t) dx = Q(t) - \zeta \phi(\ell, t) - \sigma \int_0^\ell \phi(x, t) dx. \quad (5)$$

Además, el modelo de dispersión (1)-(4) está bien formulado en el sentido de Hadamard, ya que su solución existe, es única y depende continuamente de la condición inicial y el forzamiento (Skiba and Parra-Guevara, 2015). Dicha solución se expresa en una serie de Fourier en la siguiente forma:

$$\phi(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} \left( \int_0^t d_k Q(\xi) e^{-(\lambda_k^2 \mu + \sigma)(t-\xi)} d\xi \right) \cos(\lambda_k x), \quad (6)$$

donde los coeficientes  $d_k$  están determinados por la ecuación

$$d_k = 2 \cos(\lambda_k x_0) \left[ \ell + \frac{\mu}{\zeta} \text{sen}^2(\lambda_k \ell) \right]^{-1}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (7)$$

y  $\{\cos(\lambda_k x)\}_{k=1}^{\infty}$  es un sistema ortogonal de funciones que corresponde a las frecuencias  $\{\lambda_k\}_{k=1}^{\infty}$ . Tales frecuencias son las raíces de la ecuación  $\zeta \cos(\lambda \ell) - \lambda \mu \text{sen}(\lambda \ell) = 0$ , las cuales pueden ser eficientemente calculadas con algún método numérico, por ejemplo, con el método de Newton. En los experimentos numéricos se usa la serie de Fejér obtenida a partir de la serie de Fourier (6). Tal corrección es necesaria para asegurar la convergencia puntual de la serie a la función  $\phi(x, t)$ . Esto significa que en la serie (6) se utilizan los siguientes coeficientes de Fejér:

$$\hat{d}_k = \left( 1 - \frac{(k-1)}{K} \right) d_k, \quad k = 1, 2, \dots, K, \quad (8)$$

en lugar de los valores  $d_k$ . Aquí,  $K$  es el número de truncación de la serie.

Por otra parte, la aplicación de la identidad de Lagrange al sistema de ecuaciones (1)-(4) conduce al siguiente modelo de dispersión adjunto (Skiba and Parra-Guevara, 2015):

$$-\frac{\partial g}{\partial t} - \mu \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + \sigma \phi = p(x, t), \quad 0 < x < \ell, \quad 0 < t < T, \quad (9)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial x}(0, t) = 0, \quad t > 0, \quad (10)$$

$$\mu \frac{\partial g}{\partial x}(\ell, t) = -\zeta g(\ell, t), \quad t > 0, \quad (11)$$

$$g(x, T) = 0, \quad 0 < x < \ell, \quad (12)$$

donde el forzamiento en la ecuación (9) se define como

$$p(x, t) = \delta(x - R) \delta(t - \tau) \quad (13)$$

para un sitio de monitoreo  $R$  en el dominio  $D$  y un instante  $\tau$  en el intervalo  $(0, T)$ . Es importante notar que la función adjunta se calcula resolviendo el modelo (9)-(12) hacia atrás en el tiempo, es decir, de  $t = T$  a  $t = 0$ ; por lo tanto,  $g(x_0, t) = 0$  para  $\tau < t < T$ .

La combinación de las soluciones de los modelos directo y adjunto permite establecer el principio de dualidad para la concentración de un contaminante (Skiba and Parra-Guevara, 2015):

$$\phi(R, \tau) = \int_0^T Q(t) g(x_0, t) dt. \quad (14)$$

Note que la función adjunta no depende de la tasa de emisión  $Q(t)$  y que es el núcleo de la ecuación integral (14). Dicha función también se expresa a través de una serie de Fourier como sigue:

$$g(x_0, t) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k e^{-(\lambda_k^2 \mu + \sigma)(\tau-t)} \cos(\lambda_k x_0), \quad t \leq \tau, \quad (15)$$

donde los coeficientes de Fourier  $c_k$  se calculan en la siguiente forma:

$$c_k = 2 \cos(\lambda_k R) \left[ \ell + \frac{\mu}{\zeta} \text{sen}^2(\lambda_k \ell) \right]^{-1}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (16)$$

Como se explico previamente, en los experimentos numéricos se consideran los siguientes coeficientes de Fejér para la serie (15):

$$\hat{c}_k = \left(1 - \frac{(k-1)}{K}\right) c_k, \quad k = 1, 2, \dots, K, \quad (17)$$

en lugar de los coeficientes  $c_k$ . Nuevamente,  $K$  denota el número de truncación de la serie (15).

Una vez descritos los modelos de dispersión y su adjunto, junto con sus respectivas soluciones, es posible formular el método para estimar la tasa de emisión  $Q(t)$  de una fuente contaminante. Para dicha estimación se pueden considerar datos en forma de una serie de tiempo  $\{\phi(R, t_j)\}$ , o datos distribuidos en el espacio a un tiempo fijo  $\{\phi(R_i, T)\}$ . En cualquier caso, se debe considerar que este problema inverso es inestable con respecto a los errores en los datos de concentración (Parra-Guevara and Skiba 2016; Enting, 2002), por lo cual se introduce una regularización de tipo Tijonov para lograr una mejor estimación de  $Q(t)$ .

$$\text{Minimizar } J(Q) = \frac{1}{2} \int_0^T \left(\frac{dQ}{dt}\right)^2 dt \quad (18)$$

$$\text{Sujeto a: } -\varepsilon \leq \phi_j - \int_0^T Q(t) g_j(x_0, t) dt \leq \varepsilon, \quad j = 1, \dots, M \quad \text{y} \quad (19)$$

$$Q(t) \geq 0, \quad 0 \leq t \leq T. \quad (20)$$

El objetivo de minimizar el funcional  $J$  es reducir las variaciones u oscilaciones espurias en  $Q(t)$  que son inducidas por los errores en los datos de concentración y la inestabilidad. Note que por (14) es posible escribir  $\phi(R, t_j) = \int_0^T Q(t) g_j(x_0, t) dt$ , por lo que las restricciones en (19) se interpretan como la aproximación de la concentración teórica hacia los datos de concentración experimental  $\phi_j$ . Aquí se asume que cada dato  $\phi_j$  contiene un error  $\delta\phi_j$  desconocido, es decir,  $\phi_j = \phi(R, t_j) + \delta\phi_j$ . El *parámetro de regularización*  $\varepsilon > 0$  determina el nivel de dicha aproximación y su valor depende del valor máximo de los errores en los datos (Parra-Guevara *et al.*, 2015). Por último, la restricción (20) limita la búsqueda de la tasa de emisión entre las funciones con valores no-negativos.

Note que el problema variacional (18)-(20) se ha escrito suponiendo que los datos forman una serie de tiempo. También es posible obtener una formulación equivalente para datos espacialmente distribuidos considerando que por la ecuación (14)  $\phi(R_i, T) = \int_0^T Q(t) g_i(x_0, t) dt$ , y sustituyendo (19) por  $-\varepsilon \leq \phi_i - \int_0^T Q(t) g_i(x_0, t) dt \leq \varepsilon$ . De esta forma, la recuperación de la tasa de emisión se plantea como la resolución de problemas de optimización similares, pero utilizando diferentes tipos de datos. En la siguiente sección se analizan ejemplos numéricos de ambos casos.

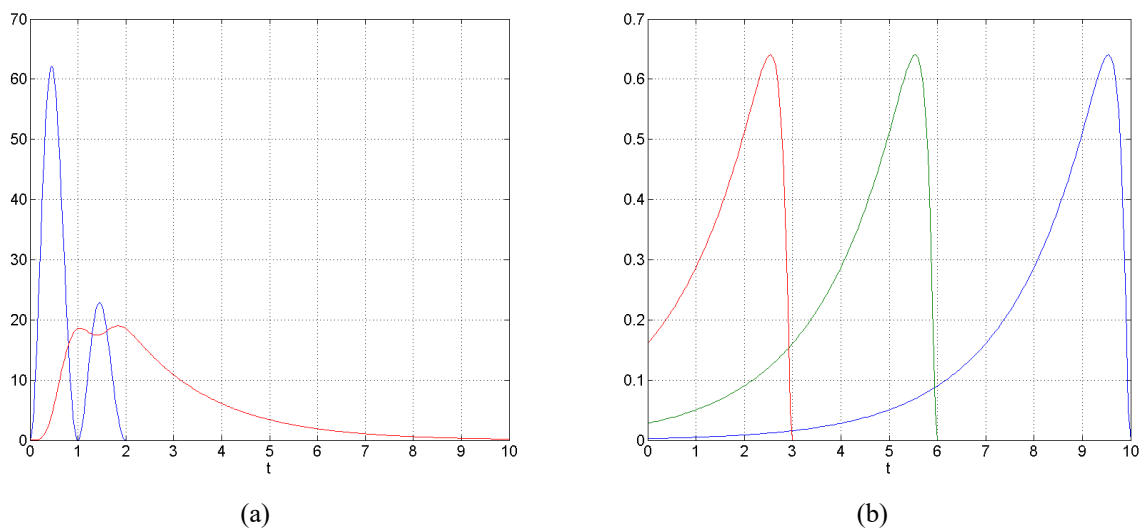
### III. EJEMPLOS NUMÉRICOS Y DISCUSIÓN

En esta sección se considera la siguiente función de prueba  $Q(t)$ :

$$Q(t) = \begin{cases} Ae^{-\gamma t} \text{sen}^2(\pi t), & 0 \leq t \leq 2 \\ 0, & 2 < t \leq T \end{cases} \quad (21)$$

El método de regularización que ha sido formulado como un problema variacional se aplica usando diferentes tipos de datos sintéticos de concentración para recuperar dicha función.

El primer ejemplo numérico utiliza una serie de tiempo con datos de concentración espaciados uniformemente en el tiempo y un tamaño de paso  $\Delta t = 0.05$ . La Figura 1a muestra la tasa de emisión de prueba  $Q(t)$  definida por la ecuación (21) y la correspondiente concentración  $\phi(R,t)$  calculada a través de la serie de Fourier-Fejér (6). En este caso, los valores de los parámetros adimensionales utilizados son:  $\mu = 0.5$ ,  $\sigma = 0.0001$ ,  $\zeta = 1.0$ ,  $x_0 = 0.2$ ,  $\ell = 1.0$ ,  $T = 10$ ,  $R = 0.8$ ,  $A = 100$ ,  $\gamma = 1.0$ ,  $K = 1000$  y  $M = 200$ . En la Figura 1b se muestran ejemplos de funciones adjuntas  $g_j(x_0, t)$  para los instantes  $t_j = 3$ ,  $t_j = 6$  y  $t_j = 10$ , y los mismos parámetros empleados en el modelo directo. Note que el cálculo de dichas funciones depende de las condiciones de dispersión y transformación de los contaminantes en la atmósfera, así como de los sitios de monitoreo y emisión, sin embargo, estas funciones son independientes de la tasa de emisión  $Q(t)$ . Una vez calculadas las funciones adjuntas a través de la serie de Fourier-Fejér (15) es posible plantear el problema (18)-(20). Este problema se discretiza usando la fórmula del trapecio para integrales y se resuelve como un problema de programación cuadrática (Parra-Guevara *et al.*, 2015), la solución se calcula aplicando directamente la rutina *quadprog* de MATLAB. Dicha solución se conoce como *solución regularizada*  $Q_\varepsilon$ .

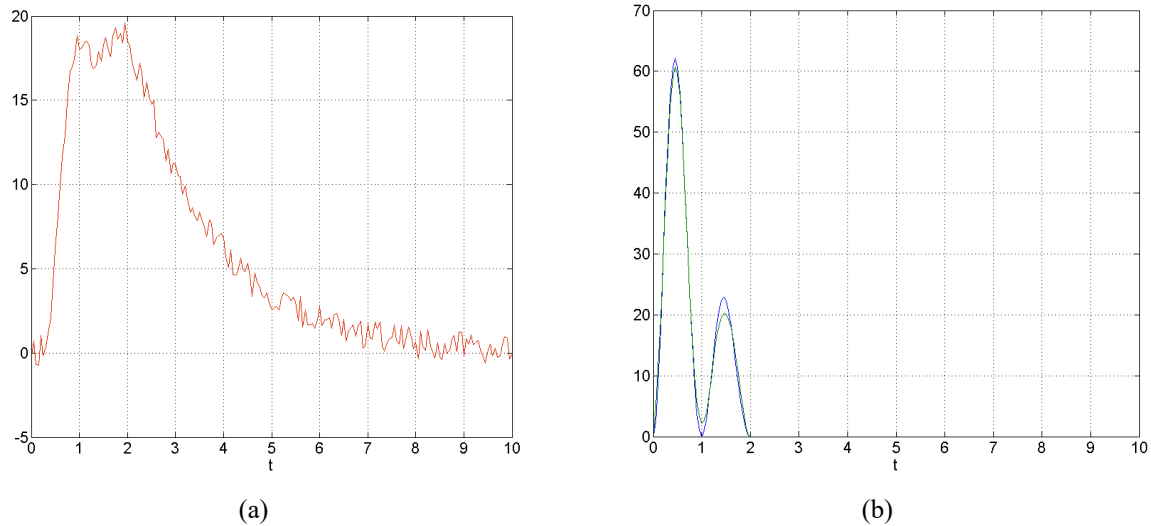


**Figura 1.** a) Tasa de emisión de prueba  $Q(t)$  (azul) y la concentración  $\phi(R,t)$  (rojo). b) Funciones adjuntas  $g_j(x_0, t)$  para los instantes  $t_j = 3.0$  (rojo),  $t_j = 6.0$  (verde) y  $t_j = 10.0$  (azul).

En este ejemplo, la serie de tiempo sintética  $\{\phi_j\}$  (datos de la concentración del contaminante) se genera por medio de la siguiente ecuación:

$$\phi_j = \phi(R, t_j) + \delta\phi_j, \quad t_j = j\Delta t, \quad j = 0, 1, \dots, M, \quad (22)$$

donde los valores  $\phi(R, t_j)$  se obtienen por medio de la serie (6), y los errores aleatorios  $\{\delta\phi_j\}$  están uniformemente distribuidos en el intervalo  $(-0.5, 0.5)$ . La amplitud de los errores fue normalizada por un factor que es el 10% del valor máximo de la función  $\phi(R, t)$ . La Figura 2 muestra los datos  $\phi_j$  y la solución regularizada  $Q_\varepsilon(t)$  obtenida.



**Figura 2.** a) Serie de tiempo sintética  $\{\phi_j\}$  para la concentración. b) Solución exacta  $Q(t)$  (azul) y solución regularizada  $Q_\varepsilon(t)$  (verde) obtenida para  $\varepsilon = \max_j \{|\delta\phi_j|\}$ .

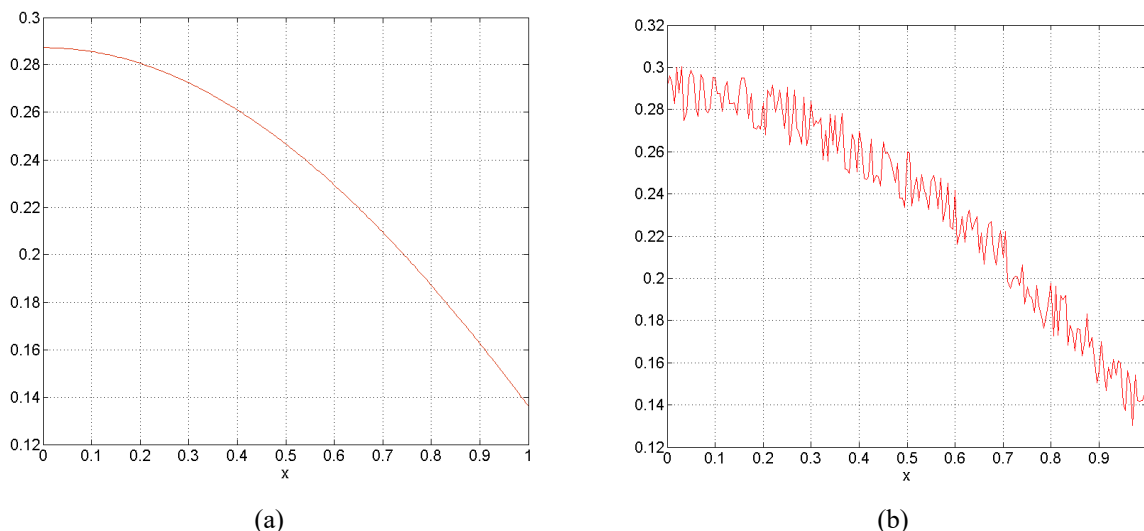
La Figura 2b muestra la tasa de emisión de prueba  $Q(t)$ , definida por la ecuación (21), y la solución regularizada  $Q_\varepsilon(t)$  que se obtiene al resolver el problema (18)-(20) para el valor del parámetro de regularización  $\varepsilon = \max_j \{|\delta\phi_j|\}$ . El resultado en la recuperación de la tasa de emisión es satisfactorio, ya que el error relativo de aproximación  $E = \|Q_\varepsilon - Q\|_2 / \|Q\|_2$  es del 5%, donde el error relativo en los datos sintéticos de concentración es de 6%, aproximadamente. Es decir, se obtiene una solución regularizada en el mismo orden de aproximación que tienen los datos utilizados. Ejemplos numéricos bidimensionales muestran un desempeño similar del método inverso cuando se utilizan datos de la concentración del contaminante en forma de una serie de tiempo (Parra-Guevara et al., 2015).

El segundo ejemplo numérico utiliza datos sintéticos espacialmente distribuidos,

$$\phi_i = \phi(R_i, T) + \delta\phi_i, \quad R_i = i\Delta x, \quad i = 1, \dots, N. \quad (23)$$

Además, para efectos de comparación con el ejemplo anterior, se considera la misma función de prueba  $Q(t)$  definida por (21) y los mismos valores de los parámetros adimensionales. También, para efectos de comparación, se han elegido tantos datos  $\phi_i$  como los considerados en la serie de tiempo del primer ejemplo, esto con el fin de tener el mismo número de restricciones en el problema variacional. Por lo tanto, se considera que  $N = 200$ ,  $\Delta x = \ell/N = 0.05$  y  $R_i = i\Delta x$ ,  $i = 1, \dots, N$ .

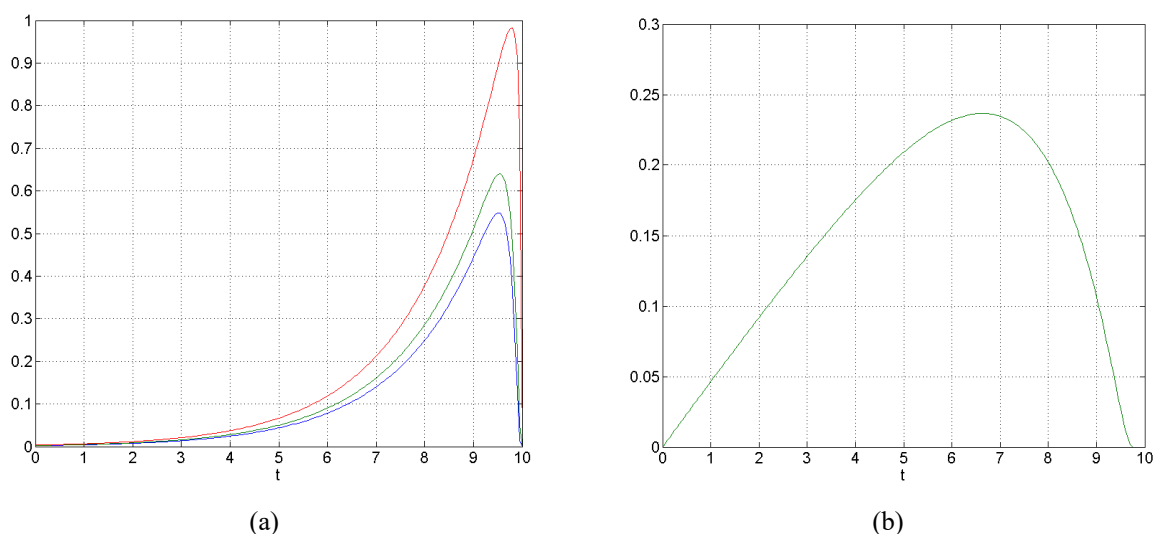
La Figura 3a muestra la concentración del contaminante  $\phi(x, T)$ ,  $0 < x < \ell$ , que se obtiene a través de la serie de Fourier-Fejér (6), mientras que en la Figura 3b se grafican los datos sintéticos de concentración obtenidos por medio de la ecuación (23). Los valores aleatorios  $\delta\phi_i$  se distribuyen uniformemente en el intervalo  $(-0.5, 0.5)$ . Como en el primer ejemplo, la amplitud de los errores fue normalizada por un factor que es el 10% del valor máximo de la función  $\phi(x, T)$ .



**Figura 3.** a) Concentración  $\phi(x, T)$  dada por la serie de Fourier-Fejér (6). b) Datos sintéticos para la concentración del contaminante  $\phi_i, i = 1, \dots, N$ .

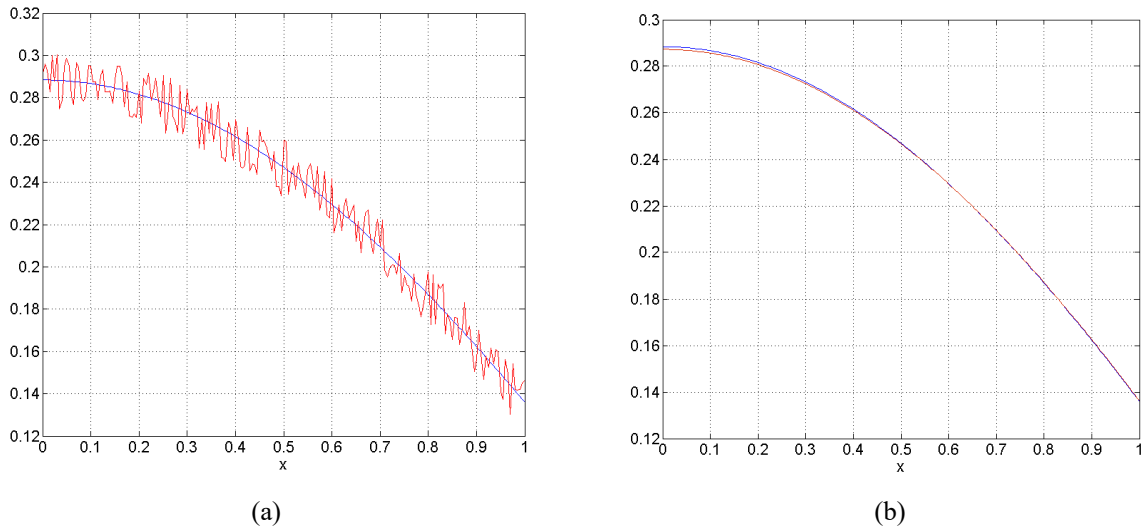
La figura 4a muestra las funciones adjuntas  $g_i(x_0, t)$  que corresponden a los sitios de monitoreo o nodos  $R_i = 0.5, 0.8$  y  $0.9$ . Note que la amplitud en cada función adjunta se incrementa conforme  $R_i$  se aproxima al punto de emisión  $x_0 = 0.2$ . Este efecto se debe al hecho de que la concentración de un contaminante es mayor cerca de la fuente de emisión.

Una vez calculadas todas las funciones adjuntas a través de la serie de Fourier-Fejér (15) es posible plantear el problema variacional (18)-(20) para los datos de concentración espacialmente distribuidos  $\phi_i$ . Este problema se discretiza usando la fórmula del trapecio para integrales y se resuelve como un problema de programación cuadrática, la solución se calcula aplicando directamente la rutina *quadprog* de MATLAB. La solución de dicho problema de optimización es la solución regularizada  $Q_\varepsilon(t)$ . La Figura 4b muestra la solución regularizada  $Q_\varepsilon(t)$  que se obtiene para  $\varepsilon = \max_i \{|\delta\phi_i|\}$ . Al comparar esta función con la tasa de emisión de prueba  $Q(t)$ , definida por (21) y trazada en la Figura 1a (línea azul), se observa que el resultado es erróneo.



**Figura 4.** a) Funciones adjuntas  $g_i(x_0, t)$  para diferentes nodos  $R_i$ : línea roja,  $R_i = 0.5$ ; línea verde,  $R_i = 0.8$ ; y línea azul,  $R_i = 0.9$ . b) Solución regularizada  $Q_\varepsilon(t)$  obtenida para  $\varepsilon = \max_i \{|\delta\phi_i|\}$ .

Las Figuras 5a y 5b muestran que la tasa incorrecta de emisión  $Q_\varepsilon(t)$ , trazada en la Figura 4b, reproduce muy bien los datos sintéticos de concentración  $\phi_i$  y la función de concentración teórica  $\phi(x, T)$ . Es decir, cuando se resuelve el modelo de dispersión (1)-(4) con la tasa de emisión  $Q_\varepsilon(t)$  entonces la concentración  $\phi_\varepsilon$  que se obtiene al tiempo  $t = T$  es la curva en color azul que se observa en las Figuras 5a y 5b. Este resultado indica que en un problema inverso la reproducción fiel de los datos experimentales no implica necesariamente que se hayan obtenido las causas correctas que generan tales observaciones. La razón fundamental de un resultado de este tipo es la existencia de muchas causas para los efectos observados en un sistema. De aquí la importancia de seleccionar datos con la capacidad de reducir el espacio de posibles causas.



**Figura 5.** a) Línea azul: concentración  $\phi_\varepsilon$  al tiempo  $t = T$  obtenida con  $Q_\varepsilon(t)$ ; línea roja: datos sintéticos  $\phi_i$ .  
 b) Línea azul: concentración  $\phi_\varepsilon$  al tiempo  $t = T$ ; línea roja: concentración exacta  $\phi(x, T)$ .

El hecho de que las funciones  $Q_\varepsilon(t)$  y  $Q(t)$  sean tan diferentes, aún cuando los datos sintéticos de la concentración  $\phi_i$  sólo contienen un pequeño error relativo del 3.5%, radica en la limitada información útil que contienen dichos datos. Para mostrar esto, consideramos la masa total emitida por la fuente puntual, es decir,  $m = \int_0^T Q(t) dt$ . En el caso de la tasa  $Q(t)$  definida por la ecuación (21) se tiene que  $m = 42.16$ . Por otra parte, la masa contenida en la función  $\phi(x, T)$  se estima como  $m_T = \int_0^\ell \phi(x, T) dx$ . En este ejemplo, la función  $\phi(x, T)$  y los datos sintéticos  $\phi_i$  contienen la misma masa  $m_T = 0.2359$ , es decir, la masa contenida en los datos representa sólo el 0.56% de la masa total emitida. Por lo tanto, los datos sintéticos  $\phi_i$  contienen menos del 1% de la historia de emisión de la fuente. Dicho de otro modo, al instante  $t = T$  el 99% de la masa emitida ha salido del dominio de observación  $D$ , o se ha transformado, y no se ve representada en los datos  $\phi_i$ . Tal incertidumbre en la información permite la existencia de muchas funciones de emisión que se ajustan a los datos sintéticos de concentración  $\phi_i$ . La tasa  $Q_\varepsilon(t)$  que determina el método de regularización es una de tales funciones.

Un segundo elemento de incertidumbre se explica a través de la siguiente ecuación que ha sido obtenida de la ecuación de balance de masa (5).

$$Q(t) = \left[ \zeta \phi(\ell, t) + \sigma \int_0^\ell \phi(x, t) dx \right] + \frac{\partial}{\partial t} \int_0^\ell \phi(x, t) dx, \quad 0 < t < T. \quad (24)$$

De tal ecuación es claro que la tasa de emisión depende de la razón de cambio, en cada tiempo  $t < T$ , de la integral de los valores espacialmente distribuidos de la concentración  $\phi$ , proceso representado por el



último término del lado derecho de la ecuación (24). Tal información no está presente en los datos sintéticos de concentración  $\phi$ , ya que estos datos se obtienen sólo para el tiempo  $t = T$ . Como en el caso anterior, tal incertidumbre en la información permite la existencia de muchas funciones de emisión que se ajustan a los datos sintéticos de concentración.

Finalmente, note que siempre hay una reducción de la información útil sobre una fuente de emisión cuando se utilizan datos espacialmente distribuidos de la concentración de un contaminante, recabados en dominios acotados con frontera abierta, y considerando tiempos grandes en el proceso de dispersión (Enting, 2002).

#### IV. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha presentado un método inverso para recuperar la tasa de emisión de una fuente contaminante a partir de datos de concentración. El método se puede formular tanto para una serie de tiempo de datos de la concentración de un contaminante atmosférico, como para datos de la concentración distribuidos en un dominio a un tiempo fijo. Las estimaciones del método son diferentes con respecto a estos conjuntos de datos. Se obtiene un buen resultado en la recuperación de la tasa de emisión usando series de tiempo, mientras que los datos espacialmente distribuidos no son viables para resolver el problema inverso. La razón es que los datos de concentración espacialmente distribuidos no contienen la información completa de la historia de emisión de la fuente contaminante.

#### V. REFERENCIAS

- Aster, R. C., Borchers, B. and Thurber, C. H. (2013). *Parameter estimation and inverse problems*. Academic Press, Elsevier.
- Enting, I. G. (2002). *Inverse problems in atmospheric constituent transport*. Cambridge, UK, University Press.
- Parra-Guevara, D. y Skiba, Y. N. (2016). Recuperación de la tasa de emisión de una fuente contaminante: Análisis de la existencia, la unicidad y la estabilidad de las soluciones. *Información Tecnológica*, 27 (5), 251-262.
- Parra-Guevara, D., Skiba, Y. N. and Reyes-Romero, A. (2015). Existence and uniqueness of the regularized solution in the problem of recovery the non-steady emission rate of a point source: Application of the adjoint method. In: *Engineering Optimization IV*, Rodrigues, H.C., et al. (eds.), 181-186. London, UK, CRC Press/Balkema, Taylor and Francis Group.
- Skiba, Y. N. and Parra-Guevara, D. (2015). *Application of adjoint equations to problems of dispersion and control of pollutants*. New York, USA, Nova Science Publishers.
- Tikhonov, A. N. and Arsenin, V. Y. (1977). *Solution of Ill-posed Problems*. Washington, USA, Wins. & Sons.
- Vautard, R., Beekmann, M. and Menut, L. (2000). Applications of adjoint modelling in atmospheric chemistry: sensitivity and inverse modelling. *Environmental Modelling and Software*, 15, 703-709.

#### AGRADECIMIENTO

Este trabajo fue apoyado con las becas 25170 y 14539 del Sistema Nacional de Investigadores (SNI, CONACyT, México).