



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



ESCUOLA TÉCNICA
SUPERIOR INGENIERÍA
INDUSTRIAL VALENCIA

Curso Académico:

AGRADECIMIENTOS

A mis directores de proyecto.

A los profesores Enrique J. Asensi , Elena Alemany y Juan Antonio Monsoriu.

A Cristina.

A toda mi familia.

RESUMEN

Hoy en día el estudio de los distintos tipos de contaminación (atmosférica, hídrica, del suelo, radiactiva, térmica, lumínica, acústica, etc.) tiene una gran importancia. La evaluación, control y búsqueda de la disminución los niveles de contaminación es el objetivo de los ingenieros que trabajan en este campo.

La información relativa a todo esto se obtiene en muchos casos a partir de sensores y se encuentra en base de datos informatizadas. El estudio y análisis de dichos datos requiere del uso de nuevas herramientas y técnicas que pueden englobarse dentro de lo que se conoce como "minería de datos". Con este propósito en este trabajo final de máster se pretenden desarrollar métodos matemáticos novedosos basados en splines cúbicos que permitan abordar la interpolación multidimensional (aproximar un conjunto de datos multidimensionales o campos vectoriales) para su aplicación a problemas concretos relativos a la contaminación ambiental. Se desea implementar aplicaciones informáticas diseñadas utilizando la herramienta Matlab App Designer, para el caso de la interpolación multidimensional y la aproximación mínimo-cuadrática de datos y validarlas con problemas reales.

Palabras clave: contaminación ambiental, splines cúbicos, interpolación multidimensional, mínimos cuadrados, ecuación del transporte, Matlab app designer.

RESUM

Sense lloc a dubte, són les activitats humanes les que, en major mesura, tenen major incidència en la contaminació que pateix el medi ambient. Hui dia l'estudi dels diferents tipus de contaminació (atmosfèrica, hídrica, del sòl, radioactiva, tèrmica, lumínica, acústica, etc.) té una gran importància. L'avaluació, control i cerca de la disminució dels nivells de contaminació és l'objectiu dels enginyers que treballen en aquest camp.

La informació relativa a tot això s'obté en molts casos a partir de sensors i es troba en base de dades informatitzades. L'estudi i anàlisi d'aquestes dades requereix de l'ús de noves eines i tècniques que poden englobar-se dins del que es coneix com a "minería de dades". Amb aquest propòsit en aquest treball final de màster es pretenen desenvolupar mètodes matemàtics nous basats en splines cúbics que permeten abordar la interpolació multidimensional (aproximar un conjunt de dades multidimensionals o camps vectorials) per a la seua aplicació a problemes concrets relatius a la contaminació ambiental. Es desitja implementar aplicacions informàtiques dissenyades utilitzant l'eina Matlab App Designer, per al cas de la interpolació multidimensional i l'aproximació mínim-quadràtica de dades i validar-les amb problemes reals.

Paraules clau: contaminació ambiental, splines cúbics, interpolació multidimensional, mínims quadrats, equació del transport, Matlab app designer.

ABSTRACT

Undoubtedly, human activities are the ones that, to a greater extent, have the greatest impact on the pollution suffered by the environment. Nowadays, the study of the different types of pollution (atmospheric, water, soil, radioactive, thermal, light, acoustic, etc.) is of great importance. The evaluation, control and search for the reduction of pollution levels is the objective of engineers working in this field.

The information related to all this is obtained in many cases from sensors and is contained in computerized databases. The study and analysis of such data requires the use of new tools and techniques that can be included in what is known as "data mining". With this purpose in this master's thesis we intend to develop novel mathematical methods based on cubic splines that allow to approach multidimensional interpolation (approximate a set of multidimensional data or vector fields) for its application to specific problems related to environmental pollution. It is desired to implement computer applications designed using the Matlab App Designer tool, for the case of multidimensional interpolation and minimum-quadratic approximation of data and to validate them with real problems.

Keywords: environmental pollution, cubic splines, multidimensional interpolation, least squares, transport equation Matlab app designer.

ÍNDICE

1.	INTRODUCCIÓN	7
1.1	Motivación, antecedentes y objetivos	7
1.2	Estructura del trabajo.....	8
2.	ESTADO DEL CONOCIMIENTO	9
2.1	Contaminación y sus tipos.....	9
2.2	Normativa sobre contaminación ambiental.....	10
2.3	Minería de datos. Interpolación y aproximación multidimensional	11
2.4	Modelización de la ecuación del transporte de contaminantes o de advección-difusión.....	12
2.5	Software de análisis de contaminación ambiental y calidad del agua	16
3.	FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS	17
3.1	Splines cúbicos	17
3.2	Splines multidimensionales	18
3.3	Aproximación mínimo-cuadrática por splines de datos.....	21
3.4	Aproximación numérica mediante splines multidimensionales de la ecuación del transporte de contaminantes.....	23
3.4.1	Condiciones de tipo Dirichlet	24
3.4.2	Condiciones de tipo Neumann	26
3.4.3	Caso de estado estacionario.....	28
3.4.4	La ecuación del transporte tridimensional.....	29
4.	DESARROLLO DE FUNCIONES Y HERRAMIENTAS INFORMÁTICAS APP DESGINER DE MATLAB.....	31
4.1	Funciones de Matlab	31
4.2	App para splines bidimensionales	38
4.3	App para splines tridimensionales	40
4.4	App para la aproximación mínimo-cuadrática por splines de dimensión uno.....	42
4.5	App para la aproximación mínimo-cuadrática por splines de dimensión dos	43
4.6	App para la resolución aproximada de la ecuación del transporte 2D	44
4.7	App para la resolución aproximada de PVI's de 2º orden.....	47
5.	ANÁLISIS Y VALIDACIÓN DE RESULTADOS.....	50
5.1	Aplicaciones de los splines multidimensionales.....	50
5.1.1	Ejemplo 1: índice de calidad del aire.....	50
5.1.2	Ejemplo 2: vertido de alquitrán.....	54
5.1.3	Ejemplo 3: contaminación lumínica	57

5.1.4	Ejemplo 4: contaminación bacteriológica	60
5.1.5	Ejemplo 5: congestión del tráfico, viento y contaminación	62
5.1.6	Ejemplo 6: contaminación sonora	65
5.1.7	Ejemplo 7: nube tóxica	68
5.2	Aplicaciones de la aproximación mínimo-cuadrática por splines	70
5.2.1	Ejemplo 1: contaminación por ozono	70
5.2.2	Ejemplo 2: contaminación por CO_2	72
5.2.3	Ejemplo 3: contaminación por abonos, fertilizantes y pesticidas	74
5.2.4	Ejemplo 4: contaminación por NO_2	75
5.3	Evaluación del método de resolución aproximada de la ecuación del transporte de contaminantes basado en splines multidimensionales	78
5.3.1	Ejemplo 1.....	79
5.3.2	Ejemplo 2.....	83
5.3.3	Ejemplo 3.....	85
5.3.4	Ejemplo 4.....	86
5.3.5	Ejemplo 5.....	88
5.3.6	Ejemplo 6.....	91
5.3.7	Ejemplo 7.....	93
5.3.8	Ejemplo 8.....	94
6.	CONCLUSIONES Y NUEVAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN	96
6.1	Conclusiones.....	96
6.2	Trabajo futuro	97
7.	BIBLIOGRAFÍA	98
7.1	Referencias	98
8.	PRESUPUESTO DEL PROYECTO	102
9.	CÓDIGOS DE LAS FUNCIONES DE MATLAB.....	105
9.1	Funciones para splines bidimensionales	105
9.2	Funciones para splines tridimensionales	106
9.3	Funciones para splines mínimo-cuadráticos	108
9.4	Funciones para resolución por splines multidimensionales de mínimos cuadrados de la ecuación del transporte de contaminantes	110
9.5	Funciones para resolución por splines de mínimos cuadrados de PVI's de 2º orden.....	113
9.6	Funciones auxiliares para calcular integrales a partir de puntos	115

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Normativa sobre contaminación ambiental.....	10
Figura 2. Ecuación de balance de masas.	12
Figura 3. Advección en la dirección x	14
Figura 4. Difusión	14
Figura 5. Ecuación del transporte de contaminantes.	14
Figura 6. Gráfica típica de $x \rightarrow Vi(x)$	18
Figura 7. Gráfica típica de $(x, y) \rightarrow Vi(x)Wj(y)$	19
Figura 8. Ejemplo de mallado tridimensional equiespaciado.....	20
Figura 9. Ejemplo de mallado bidimensional no equiespaciado	20
Figura 10. Ejemplo de mallado bidimensional incompleto.....	21
Figura 11. El laboratorio virtual splinesBID (ver ejemplo 5.1.5).....	38
Figura 12. Formato fichero de Excel para splinesBID y splinesBMC.	39
Figura 13. El laboratorio virtual splines3D	40
Figura 14. Formato fichero de Excel para splines3D.	41
Figura 15. El laboratorio virtual splinesMC (ver ejemplo 5.2.1).	42
Figura 16. El laboratorio virtual splinesBMC (ver ejemplo 5.2.3).....	44
Figura 17. El laboratorio virtual transporteSPLI y los gráficos generados (ver ejemplo 5.3.2).....	46
Figura 18. El laboratorio virtual PVI spline y los gráficos generados (ejemplo 5.3.7).	48
Figura 19. Formato fichero de Excel para PVI spline.	49
Figura 20. Página web mapa ICA	52
Figura 21. Gráfica de las concentraciones de los contaminantes	52
Figura 22. Gráficas de las concentraciones de $PM_{2.5}$ y PM_{10}	53
Figura 23. Gráficas de las concentraciones de NO_2 y O_3	53
Figura 24. Gráficas de las concentraciones de SO_2	53
Figura 25. Índice de calidad del aire por tiempo (colores: verde bueno, amarillo regular, rojo malo)	54
Figura 26. Operario trabajando en un vertido de alquitrán.....	54
Figura 27. Recinto del vertido y nodos utilizados.	55
Figura 28. Mallado utilizado para la aproximación por splines bidimensionales.	55
Figura 29. Concentración de alquitrán exacta.	56
Figura 30. Concentración de alquitrán aproximada (splines BD)	56
Figura 31. Error concentración de alquitrán (superficie).	57
Figura 32. Error concentración de alquitrán en kg/m^2 (seudocolores).	57
Figura 33. Página web www.lightpollutionmap.info (mapa contaminación lumínica).....	58
Figura 34. Mallado utilizado en el ejemplo 3.....	58
Figura 35. Mapa radiancia de Requena	59
Figura 36. Gráfica de líneas de contorno de la concentración ($ufc/100 cm^3$) correspondiente a $t = 772$	60
Figura 37. Concentración bacteriológica ($ufc/100 cm^3$) $t = 500, 525, 550, \dots, 700$	61
Figura 38. Gráfica del error relativo medio.....	62
Figura 39. Tráfico congestionado en la calle Játiva de Valencia.	62
Figura 40. Gráfica de seudocolores de la concentración de CO	63
Figura 41. Gráfica de líneas de contorno de la concentración de CO	64
Figura 42. Gráfica de CI vs concentración de CO para la velocidad del viento de $11 m/s$	64

Figura 43. Gráfica de velocidad del viento vs concentración de CO para un valor de CI de 2.5.	64
Figura 44. Contaminación sonora.	65
Figura 45. Mallado usado en las mediciones.....	65
Figura 46. Mapas de ruido (dBA) correspondientes a $t=60,70, 80, \dots, 170$ min.	67
Figura 47. Mapa de ruido (dBA) de curvas isófonas en $t=90$ min.	67
Figura 48. Gráfica de pseudocolores de la concentración de dioxina (kg/m^3) a alturas 5, 5.5 y 6 m.	69
Figura 49. Gráfica de líneas de contorno de la concentración de dioxina (kg/m^3) a 3 m de altura.	69
Figura 50. Contaminación por ozono troposférico.....	70
Figura 51. Aproximaciones por el spline y el polinomio de mínimos cuadrados.	71
Figura 52. Errores de las aproximaciones por el spline y el polinomio de mínimos cuadrados.....	71
Figura 53. Aproximaciones por el spline y el polinomio de mínimos cuadrados en el caso de errores aleatorios.	72
Figura 54. Errores en las aproximaciones por el spline y el polinomio de mínimos cuadrados en el caso de errores aleatorios.....	72
Figura 55. Medidor de CO_2	73
Figura 56. Aproximaciones de las concentraciones de CO_2 (ppm).	74
Figura 57. Aproximación de la concentración de contaminantes por splines BD.....	75
Figura 58. Error de la aproximación de la concentración de contaminantes (mg/l) por splines BD.	75
Figura 59. Estaciones de medición.....	76
Figura 60. Gráfica de pseudocolores de la aproximación de la concentración de NO_2 ($\mu g/m^3$).	76
Figura 61. Gráfica de líneas de contorno de la aproximación de la concentración de NO_2 ($\mu g/m^3$).	78
Figura 62. Gráfica de superficie de la aproximación de la concentración de NO_2 ($\mu g/m^3$).	78
Figura 63. Mallado usado en el ejemplo 1.	80
Figura 64. Solución exacta para C (kg/m^3).	80
Figura 65. Solución aproximada para C (kg/m^3) por splines MD.	81
Figura 66. Gráfica del error cometido para C (kg/m^3).	81
Figura 67. Solución aproximada para C (kg/m^3) por el método de las DF con 15×15 nodos.....	82
Figura 68. Solución aproximada para C (kg/m^3) por el método de las DF con 15×100 nodos.	82
Figura 69. Solución exacta.	84
Figura 70. Solución aproximada por splines MD.....	84
Figura 71. Error de la solución aproximada por splines MD.	84
Figura 72. Solución exacta.	85
Figura 73. Solución aproximada por splines MD.....	86
Figura 74. Error de la solución aproximada por splines MD.	86
Figura 75. Solución aproximada por splines MD.....	88
Figura 76. Solución exacta, aproximada por splines MD y aproximada por DF para la concentración de materia orgánica.	90
Figura 77. Gráfica de los errores cometidos por splines MD y DF para la concentración de materia orgánica.	90
Figura 78. Solución exacta, aproximada por splines MD y aproximada por DF para el oxígeno.....	91
Figura 79. Gráfica de los errores cometidos por splines MD y DF del ejemplo 5.	91
Figura 80. Gráfica de $L(x)$ aproximada por splines MD y por DF.	92
Figura 81. Gráfica de $O_2(x)$ aproximada por splines MD y por DF.	93
Figura 82. Gráficas de la concentración de contaminante exacta, aproximada por splines MD y aproximada por DF.....	93
Figura 83. Gráficas de los errores cometidos.	94

Figura 84. Gráficas de la concentración de contaminante exacta, aproximada por splines MD y aproximada por DF.....	95
Figura 85. Gráficas de los errores cometidos.	95

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Cálculo del índice de calidad del aire.....	50
Tabla 2. Concentraciones de los contaminantes.....	50
Tabla 3. Índice de calidad del aire por tiempo.	54
Tabla 4. Medición de la radiancia ($10 - 9 W/cm^2$) en los puntos del mallado.	59
Tabla 5. Mediciones de la concentración de CO en $\mu g/m^3$	63
Tabla 6. Valores en $dB A$ medidos en $t=0,60,120, 180$ y 240 minutos.....	66
Tabla 7. Concentración de dioxina en kg/m^3 para alturas $0, 2.5, 5, 7.5$ y 10 m.	68
Tabla 8. Concentración de CO_2 en ppm (partes por millón).....	73
Tabla 9. Mediciones de la concentración de NO_2 ($\mu g/m^3$).	76
Tabla 10. Mediciones correspondientes al ejemplo 4.	87
Tabla 11. Valores de E y u en el tramo del río considerado.....	91
Tabla 12. Costes por hora de maquinaria y software	102
Tabla 13. Cuadro de precios básicos	103
Tabla 14. Cuadro de presupuestos parciales.....	103

MEMORIA

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Motivación, antecedentes y objetivos

La contaminación consiste en la presencia en el aire, agua o suelo de sustancias o formas de energía (calor, sonido, luz, radiactividad, vibraciones, etc.) no deseables en concentraciones tales que puedan afectar al confort, salud y bienestar de los seres vivos. Se trata, sin lugar a duda, de una de las principales preocupaciones del hombre en nuestro tiempo. Desarrollo sostenible, calentamiento global, cambio climático, efecto invernadero, cuidado del medio ambiente, etc. son conceptos que nos son familiares y que nos hacen ser conscientes de los graves problemas relacionados con el crecimiento económico incontrolado, industrialización, aumento de la población y los efectos perniciosos correspondientes, que se manifiestan en muchos casos con los diversos tipos de contaminación.

Los ingenieros que trabajan sobre el tema buscan controlar y medir los niveles de contaminación y elaborar estrategias tendientes a disminuir dichos niveles. El objetivo es mejorar la calidad del aire, del agua y de nuestros suelos. Desde hace muchos años se viene recogiendo una gran cantidad y variedad de información relativa a la contaminación ambiental, debido al aumento de estaciones de medición, la mejora de los sensores empleados y la utilización de satélites, drones, etc. Otro campo interesante es el desarrollo de modelos predictivos de los fenómenos relacionados.

A la hora de estimar datos a partir de otros conocidos la interpolación espacial es una de las herramientas más utilizadas (Ascher y Greif, 2011; Sámano, 2011). Hoy en día se está investigando en el diseño de nuevas herramientas y técnicas para la aproximación e interpolación de datos multidimensionales (ver el apartado 2.3 de la memoria). La modelización del transporte de contaminantes en fluidos a partir de ecuaciones diferenciales y en derivadas parciales también ha sido objeto de muchos trabajos, por ejemplo (Bueno et al, 1997) y (Sánchez, 2009) y continúa siendo una de las principales líneas de investigación. En el apartado 2.4 se profundiza sobre el tema.

En este trabajo se desarrollan con detalle algunos métodos basados en los splines multidimensionales para la interpolación y aproximación mediante mínimos cuadrados de datos espacio-temporales, como los correspondientes a los obtenidos por la medición de diversos parámetros vinculados con distintos contaminantes. También se propone un método novedoso basado en dichos splines para la resolución numérica aproximada de la ecuación del transporte de contaminantes en fluidos (aire y agua). De todos estos métodos se han programado las correspondientes aplicaciones informáticas (Matlab App Designer) y validado con ejemplos concretos que muestran las ventajas respecto de otros métodos.

Los objetivos del presente estudio son:

- Estudiar los splines multidimensionales y sus propiedades
- Explicar cómo se construyen los splines mínimo-cuadráticos de dimensiones uno y dos.
- Conocer la modelización matemática del transporte de contaminantes en agua y aire.
- Desarrollar el método de los splines multidimensionales para la resolución aproximada de la ecuación del transporte de contaminantes.
- Comparar los métodos de splines multidimensionales con otros métodos.

- Crear un software con una interfaz sencilla, atractiva, fácil de utilizar y que no requiere de conocimientos especiales de programación de Matlab, para la aplicación práctica de los splines multidimensionales en la interpolación, aproximación por mínimos cuadrados y resolución de la ecuación del transporte de contaminantes.
- Analizar pormenorizadamente y validar las aplicaciones informáticas desarrolladas por medio de ejemplos ilustrativos correspondientes a diferentes casos de contaminación.

1.2 Estructura del trabajo

Este documento está estructurado como sigue:

MEMORIA

- ❖ Capítulo 1: de introducción, donde se presenta el trabajo, los antecedentes y los objetivos perseguidos.
- ❖ Capítulo 2: donde se hace un repaso del estado de conocimiento relativo a la contaminación y sus tipos, la normativa vigente, la interpolación y aproximación de datos, la modelización de la ecuación del transporte de contaminantes y los distintos métodos numéricos para su resolución aproximada.
- ❖ Capítulo 3: repaso de los fundamentos matemáticos sobre interpolación, aproximación por mínimos cuadrados y resolución numérica de la ecuación del transporte de contaminantes mediante splines multidimensionales.
- ❖ Capítulo 4: dedicado a la programación a partir de funciones de Matlab y desarrollo de interfaces gráficas de usuario (app designer) de los algoritmos descritos en el capítulo anterior.
- ❖ Capítulo 5: de análisis y valoración de los resultados obtenidos por el software generado, a partir de ejemplos concretos de distintos tipos de contaminación.
- ❖ Capítulo 6: conclusiones y posibles líneas de trabajo futuras.
- ❖ Capítulo 7: referencias bibliográficas.

PRESUPUESTO

- ❖ Capítulo 8

APÉNDICE

- ❖ Capítulo 9: códigos de las funciones de Matlab creadas.

2. ESTADO DEL CONOCIMIENTO

2.1 Contaminación y sus tipos

A grandes rasgos puede definirse la contaminación como la presencia de sustancias, organismos, formas de energía y otros elementos físicos en un entorno dado, que suponen un riesgo para la salud de los seres vivos que allí se encuentran.

Se puede distinguir entre contaminación natural (incendios, erupciones, terremotos, tsunamis, crecimiento incontrolado de microorganismos, erosión, desprendimientos de tierras, etc.) y la artificial (debida a actividades humanas: extracción de minerales y combustibles fósiles, generación de energía, transporte, actividad industrial, agricultura, ganadería, generación de residuos, etc.). En función de su origen los contaminantes se clasifican en primarios (vertidos directamente por fuentes emisoras) y secundarios (transformados a partir de reacciones químicas o físicas).

Otra clasificación de los tipos de contaminación es:

- Atmosférica (compuestos nitrogenados, dióxido de azufre, monóxido de carbono, material particulado PM, metano, compuestos orgánicos volátiles, hidrocarburos, ozono troposférico, etc.).
- Hídrica o del agua (vertidos industriales, abonos, insecticidas, plaguicidas, plásticos, desechos fecales, contaminación microbiológica, etc.).
- Del suelo (vertidos, filtración de aguas contaminadas, deforestación y erosión del suelo, residuos, arrastre de contaminantes por la lluvia, etc.).
- Térmica (debida al aumento de temperatura o calentamiento global).
- Sonora (debida a ruidos o vibraciones excesivas).
- Lumínica (debida a iluminación artificial excesiva).
- Radiactiva (generada por emisión de materiales radiactivos por accidentes en centrales nucleares o almacenes de residuos radiactivos).
- Genética (transferencia incontrolada de material genético entre las plantas)

La contaminación y la explotación incontrolada de los recursos naturales son las principales causas del empobrecimiento y destrucción paulatina de muchos ecosistemas, de la desaparición de especies, del cambio climático por el calentamiento global, del deterioro del paisaje y de muchas enfermedades.

La protección del medio ambiente es uno de los mayores desafíos con los que se encuentra el ser humano. La educación y la gestión de la prevención son la clave para controlar de manera efectiva este grave problema. La evaluación, control y búsqueda de la disminución los niveles de contaminación es el principal objetivo de los ingenieros que trabajan en este campo.

Las referencias (Gallego, 2012; Seoánez, 2002) permiten profundizar sobre el tema, así como los videos de la profesora Amparo López que se pueden encontrar en el repositorio RIUNET de la Universitat Politècnica de València.

2.2 Normativa sobre contaminación ambiental

La legislación sobre medio ambiente se establece teniendo en cuenta la normativa existente a nivel Comunitario, Estatal, Autonómico y Municipal. Se define así una estructura legislativa en pirámide, de manera que tienen que cumplirse todas las normas ambientales, siendo éstas cada vez más restrictivas según vamos bajando niveles jerárquicos (ver figura 1).

La Unión Europea establece una normativa medioambiental relativa a la contaminación y el cambio climático, protección de la biodiversidad y la economía circular y sostenible. A nivel estatal las leyes sobre medio ambiente parten del artículo 45 de la Constitución:

Artículo 45

- 1. Todos tienen el derecho a disfrutar de un medio ambiente adecuado para el desarrollo de la persona, así como el deber de conservarlo.*
- 2. Los poderes públicos velarán por la utilización racional de todos los recursos naturales, con el fin de proteger y mejorar la calidad de la vida y defender y restaurar el medio ambiente, apoyándose en la indispensable solidaridad colectiva.*
- 3. Para quienes violen lo dispuesto en el apartado anterior, en los términos que la ley fije se establecerán sanciones penales o, en su caso, administrativas, así como la obligación de reparar el daño causado.*



Figura 1. Normativa sobre contaminación ambiental.

Las Comunidades Autónomas también poseen capacidad legislativa sobre el tema, no así los ayuntamientos que solo disponen de potestad reglamentaria para regular como se aplican las leyes.

La Organización de las Naciones Unidas (ONU) en 2015 fijo 17 Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) con la finalidad de asegurar un desarrollo sostenible, velar por el planeta y sus habitantes y erradicar la pobreza. Estos objetivos intentan marcar las directrices de actuación de todos los países miembros de la ONU.

Con relación a España la normativa contempla legislaciones ambientales sobre Aguas Continentales y Aguas Marinas, sobre Cambio Climático, sobre Residuos, sobre la Atmósfera, sobre Ruido, sobre Responsabilidad Medioambiental, sobre Actividades Clasificadas, sobre Evaluación Ambiental y sobre Suelos Contaminados.

Sobre el tema pueden consultarse las páginas web (ENVIRA, 2021) y (MITECO A, 2021) .

2.3 Minería de datos. Interpolación y aproximación multidimensional

La información relativa a la contaminación ambiental se obtiene a partir de muestreos de los parámetros ambientales (de contaminantes y meteorológicos) obtenidos en estaciones de medición o por otros medios (satélites, fotografías, etc.). Tiene mucha importancia disponer también de la información relativa a los tiempos y frecuencias de muestreo. El estudio y análisis de dichos datos requiere del uso de nuevas herramientas y técnicas que aprovechan la potencia de los ordenadores y que pueden englobarse dentro de lo que se conoce como "*minería de datos*". Sobre esto puede consultarse (Contreras, 2016).

En muchos casos es interesante disponer de métodos que permitan estimar valores desconocidos a partir de valores conocidos, es decir, interpolar o aproximar un conjunto de datos en concreto, datos que en muchas ocasiones tienen dimensión mayor que uno. Se trata de un conjunto de datos (valores discretos) que provienen de un proceso que presenta un comportamiento continuo. Con más generalidad, la idea es, a partir de un conjunto de datos $\{(X_i, Y_i)\}$ que se supone provienen de un campo vectorial $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ (con $Y_i = F(X_i)$), idear un procedimiento para aproximar $F(X)$ para puntos X cercanos a los $\{X_i\}$.

Algunos de los métodos de interpolación en dos variables más usados son de tipo geométrico (método de los polígonos de Voronoi, método del inverso de la distancia (IDW), interpolación bilineal, interpolación lineal, interpolación por splines cúbicos bidimensionales, etc. o geoestadístico (método del Kriging o Krigeaje). Al respecto pueden consultarse las referencias (Ascher y Greif, 2011) y (Giménez et al A, 2014). En dimensiones mayores que dos pueden usarse los métodos de la interpolación trilineal (3D), de la interpolación tricúbica (3D), del inverso de la distancia, de los splines multidimensionales (Habermann y Kindermann, 2007), de Hermite multidimensional, del Kriging, etc. (De Boor y Ron, 1992; Hernández y León, 2016; Giménez et al B, 2014; Londo, 2012; Olea, 1999).

Otra idea interesante es, a partir de un conjunto de datos $\{(X_i, Y_i)\}$ con $X_i \in \mathbb{R}^n$ e $Y_i \in \mathbb{R}^m$, hallar una función F de manera que $F(X_i) \approx Y_i$ imponiendo alguna condición de mínimo. En el caso de datos en el plano ($n = m = 1$) pueden usarse los polinomios y splines de mínimos cuadrados. Estos métodos pueden generalizarse para dimensiones superiores. Puede consultarse la referencia (Aymerich et al, 1985). Además, existen otras técnicas de tipo estadístico (Green y Silverman, 1994).

2.4 Modelización de la ecuación del transporte de contaminantes o de advección-difusión

En este apartado se muestra cómo se puede modelizar matemáticamente el transporte y dispersión de contaminantes en un medio fluido (agua o aire) a partir de ciertas ecuaciones diferenciales y en derivadas parciales. El modelado debe tener en cuenta la llamada ecuación de balance de masas (ver figura 2).

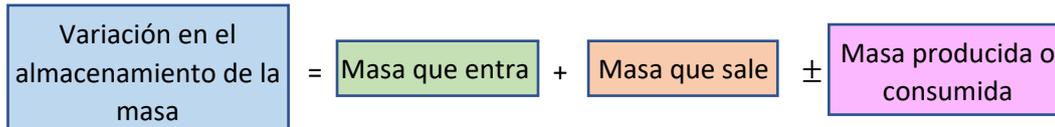


Figura 2. Ecuación de balance de masas.

Si el contaminante se mueve por el flujo del fluido se producen procesos de advección, difusión y dispersión. En el caso de los contaminantes sean reactivos también hay que contemplar procesos de absorción, precipitación, disolución, reacciones químicas y biológicas, etc. Como evoluciona la concentración de una sustancia contaminante está claramente influenciada por la acción conjunta de estos procesos.

El arrastre de la sustancia contaminante debido al movimiento propio del fluido recibe el nombre de *advección* y puede ser descrito matemáticamente a partir de la dirección y magnitud de la velocidad. En el caso de una dimensión la densidad de flujo debido a la advección satisface

$$J_a = Cv$$

siendo J_a la densidad de flujo (M/L^2T), C es la concentración (M/L^3) y v la velocidad del fluido (L/T) (aquí M , T y L son las dimensiones de masa, tiempo y volumen utilizadas).

La *difusión* tiene que ver con que la sustancia contaminante se mueve de un lugar a otro de las zonas de mayor concentración a las de menor concentración debido a un movimiento aleatorio de las moléculas (*difusión molecular*), del fluido (*difusión turbulenta*) o por una combinación de ambos. La difusión turbulenta es mayor que la molecular. En el caso de una dimensión la primera ley de Fick permite describir la densidad de flujo debido a la difusión por

$$J_d = -D \frac{dC}{dx}$$

donde J_d es la densidad de flujo (M/L^2T), D es una constante llamada coeficiente de transporte de Fick o de difusión (L^2/T), C es la concentración (M/L^3) y x es variable espacial. La primera ley de Fick establece que el flujo J_d en la dirección x es proporcional al gradiente de concentraciones en esa dirección. Si el fluido es el agua los valores de D son conocidos. En un medio poroso (aguas subterráneas) la difusión no ocurre tan rápido como en el agua y hay que usar un coeficiente de difusión efectivo

$$D^* = \omega D$$

En el caso más general de tres dimensiones la ley se expresa por la ecuación

$$J_d = -D\Delta C$$

donde ∇ es el operador gradiente y $D = (D_x, D_y, D_z)$ son los coeficientes de difusión en las direcciones x , y y z . La dispersión se produce porque los contaminantes se esparcen debido a la diferencia de velocidad entre los puntos del fluido y , en el caso de la difusión molecular, al movimiento browniano.

El flujo expresado en la primera ley de Fick no tiene en cuenta el tiempo. Si se tiene en cuenta el tiempo a partir de la primera ley de Fick y el principio de conservación de la masa, en ausencia de reacciones químicas, se cumple la llamada segunda ley de Fick:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla C)$$

Las figuras 3 y 4 muestran gráficamente los procesos de advección y difusión. Sobre el tema pueden consultarse las referencias (Sámano, 2011; Sánchez, 2009).

Para describir el transporte de un contaminante en cualquier masa de aguas superficiales (lago, río, estuario, mar) se tiene la ecuación en derivadas parciales (que contempla los procesos de advección, difusión y reacción) dada por (Wu Y Falconer, 2000; Sámano, 2011; García, 2004):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial(u_x C)}{\partial x} - \frac{\partial(u_y C)}{\partial y} - \frac{\partial(u_z C)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \pm R \quad (2.1)$$

donde

- $C(t, x, y, z)$ es la concentración del contaminante en el punto (x, y, z) e instante t .
- t es el tiempo
- $u = (u_x, u_y, u_z)$ es la velocidad del agua en el punto (x, y, z) e instante t .
- $D = (D_x, D_y, D_z)$ son los coeficientes de difusión/dispersión en las direcciones x , y y z en el punto (x, y, z) e instante t .
- $R(t, x, y, z)$ es el término de reacción en el punto (x, y, z) e instante t . Recoge las fuentes o sumideros que influyen en la cantidad total del contaminante (aumenta o disminuye respectivamente) y su concentración. La ecuación (2.1) representa un balance de masas en un elemento diferencial de volumen, de modo que el término R incluye las entradas y/o salidas del contaminante a través de las fronteras del elemento diferencial de volumen que no sean debidas al transporte advectivo o difusivo/dispersivo (p. e. vertidos distribuidos) y también incluye los procesos físicos, químicos y/o biológicos que conducen a la aparición y/o desaparición del contaminante en el elemento diferencial de volumen.

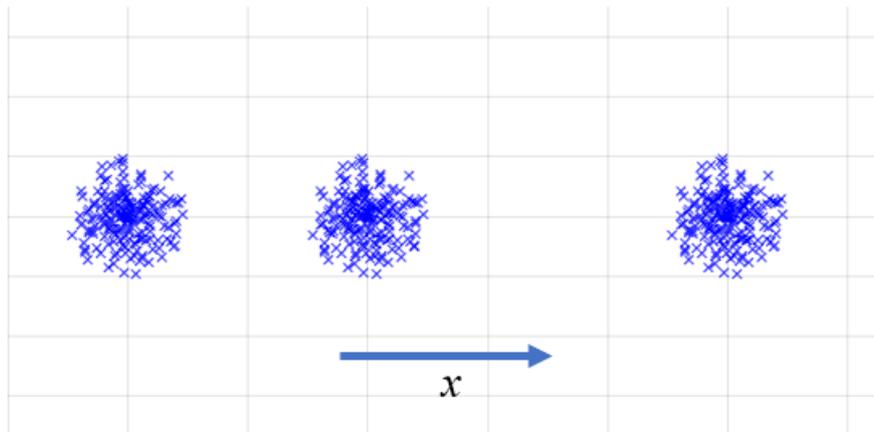


Figura 3. Advección en la dirección x.

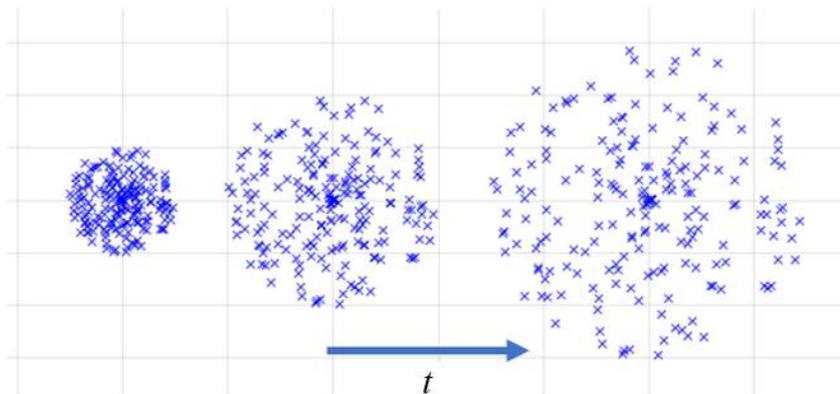


Figura 4. Difusión

Las figuras 3 y 4 es una representación gráfica simplificada de los procesos de advección y difusión. La figura 5 muestra las distintas componentes de la ecuación del transporte de contaminantes.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \underbrace{\frac{\partial(u_x C)}{\partial x} - \frac{\partial(u_y C)}{\partial y} - \frac{\partial(u_z C)}{\partial z}}_{\text{advección}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)}_{\text{difusión}} \pm \underbrace{R}_{\text{reacción}}$$

Figura 5. Ecuación del transporte de contaminantes.

Trabajando con dos dimensiones y considerando la concentración promediada en profundidad (2.1) adopta la forma (Kleinschmith y Pearce, 1992):

$$\frac{\partial(HC)}{\partial t} = -\frac{\partial(u_x HC)}{\partial x} - \frac{\partial(u_y HC)}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(HD_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(HD_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \pm R \quad (2.2)$$

donde

- $C(t, x, y)$ es la concentración del contaminante promediada en profundidad en el punto (x, y) e instante t .
- t es el tiempo
- H profundidad en el punto (x, y) e instante t .
- $u = (u_x, u_y)$ es la velocidad del agua promediada en profundidad en el punto (x, y)
- $D = (D_x, D_y)$ son los coeficientes de dispersión horizontal en las direcciones x , e y en el punto (x, y) e instante t .
- $R(t, x, y)$ es el término de reacción en el punto (x, y) e instante t .

Simplificando todavía más, en el caso unidimensional la ecuación del transporte de contaminantes se escribe (Aristodemou et al, 1992):

$$\frac{\partial(AC)}{\partial t} = -\frac{\partial(uAC)}{\partial x} + \frac{\partial \left(DA \frac{\partial C}{\partial x} \right)}{\partial x} + R \quad (2.3)$$

donde

- $C(t, x)$ es la concentración promediada en superficie en el punto x e instante t .
- $A(t, x)$ es el área en el punto x e instante t (área de la sección transversal a la dirección x).
- t es el tiempo.
- x es la distancia.
- $u(t, x)$ es la componente de velocidad promediada en la sección transversal a la dirección x e instante t .
- $D(t, x)$ es el coeficiente de dispersión en la dirección x en el punto x e instante t .
- $R(t, x)$ es el término de reacción en el punto x e instante t .

Si se trata de aguas subterráneas el agua no viaja a una velocidad constante y se produce lo que se conoce con el nombre de dispersión mecánica (debido a la mezcla del contaminante con el agua). Cuando se producen procesos reactivos la complejidad aumenta considerablemente.

Para que el problema esté completamente definido y las ecuaciones en derivadas parciales (2.1), (2.2) y (2.3) que lo modelizan tengan una única solución se hace necesario establecer condiciones iniciales y de contorno, así como los parámetros que aparecen. Las condiciones iniciales hacen referencia a que son conocidas las concentraciones iniciales del contaminante. Las de contorno pueden ser de tipo Dirichlet (conocida la concentración en una parte del contorno), de Neumann (de borde prescrito) y Cauchy o mixta (combinación de ambas).

Tan solo en unos pocos casos se conoce la solución analítica de la ecuación del transporte de contaminantes, por lo que es necesario en la mayoría de las ocasiones emplear métodos numéricos para

obtener una solución aproximada. En (Sámano, 2011; Sánchez, 2009) se hace un repaso exhaustivo de los distintos esquemas numéricos usados para resolver la ecuación del transporte:

- los métodos de tipo Euleriano utilizan una discretización de malla fija junto con una ecuación de paso de tiempo de concentración (métodos de las diferencias finitas, de los elementos finitos y de los volúmenes finitos)
- los métodos de tipo Lagrangiano se basan en una rutina de seguimiento de partículas (Random Walk Particle Tracking y Continuous Time Random Walk)
- los métodos de tipo Euleriano-Lagrangiano (métodos de las características, métodos de las características modificadas y métodos de las características modificadas híbrido)

En (Zorsahín et al, 2018; Szymkiewicz, 1993; Maron y Gutierrez, 2013) se resuelve de forma aproximada la ecuación de advección-difusión usando B-splines, splines cúbicos junto con diferencias finitas y splines junto con elementos finitos respectivamente. Otras referencias sobre ecuaciones diferenciales y en derivadas parciales y splines son (Srivastava, 2014; Kalyani y Rama, 2013).

Es interesante la referencia (López, 2016) para introducirse en la modelización matemática del transporte de contaminantes y como proceder para calibrar y validar dicho modelo. Esta modelización requiere, en el caso de los ríos, el conocimiento de parámetros hidrológicos (caudal, velocidad, coeficiente de dispersión) y geométricos (profundidad, anchura, sección transversal, pendiente). En palabras de la profesora Amparo López “*la calibración consiste en la puesta a punto del modelo, modificando los parámetros de los que dependen las ecuaciones para que la solución sea fiable*”. Cuando ya se tienen los parámetros fijos se compara con otros datos espaciales o temporales de los que se disponga para validar el modelo propuesto. En muchas ocasiones a obtención de estos datos procede de ensayos experimentales, por ejemplo, en tanques de laboratorio y con ensayos de trazadores.

2.5 Software de análisis de contaminación ambiental y calidad del agua

Algunos de los programas informáticos más utilizados para la modelización y análisis de la dispersión atmosférica de los contaminantes son ALOHA, AERMOD, CALPUFF, DISPER, SCREEN3, EIAE9, etc. Otros más específicos son: BLP, CALINE3, AL3QHC/CAL3QHCR, CTDMPLUS, etc. Para ampliar información sobre alguno de estos programas ver (Contreras, 2016; Franco, 2018).

Sobre calidad del agua podemos citar a WASP de la EPA de EEUU y otros como EFDC, QUAL2K, AQUALAB, LABAQUA y AQUATOOL (éste último del Instituto Universitario de Investigación de Ingeniería del Agua y Medio Ambiente de la Universitat Politècnica de València).

3. FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS

En este capítulo se presenta con detalle cómo se construyen los splines cúbicos multidimensionales, los splines mínimo cuadráticos de dimensiones uno y dos que aproximan a un conjunto de puntos del plano y del espacio respectivamente y una aplicación a la resolución aproximada de problemas de contorno con condiciones de Dirichlet y de Neumann de las ecuaciones en derivadas parciales de 2° orden que modelizan la llamada ecuación del transporte de contaminantes o de advección-difusión. También se estudia con detalle el caso estacionario.

3.1 Splines cúbicos

Intuitivamente un spline cúbico es una función con derivada segunda continua que a trozos viene definida por polinomios cúbicos. Una definición más rigurosa es la siguiente:

Se llama *spline cúbico* a una función con derivada segunda continua tal que hay valores x_1, x_2, \dots, x_n con $a = x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$ de forma que

$$S(x) = p_j(x), \quad x \in [x_j, x_{j+1}] \quad j = 1, \dots, n-1$$

donde p_j es un polinomio de grado menor o igual que 3.

Es bien conocido que dados x_1, x_2, \dots, x_n con $a = x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$, y_1, y_2, \dots, y_n y dos números α y β cualesquiera, existe un único spline cúbico $S: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ que cumple

$$S(x_i) = y_i, \quad i = 1, \dots, n$$

$$S'(a) = \alpha, \quad S'(b) = \beta.$$

Las dos condiciones adicionales anteriores definen lo que se llama el *spline completo*. Estas pueden sustituirse por $S''(a) = S''(b) = 0$ (*spline natural*) o imponiendo que la tercera derivada de S sea continua en el segundo y penúltimo nodo (*spline knot a knot*).

Una forma alternativa de construir el spline viene dada por

$$S(x) = \sum_{i=1}^n y_i V_i(x) \tag{3.1}$$

donde V_i es el spline cúbico que satisface

$$V_i(x_j) = \delta_{ij}, \quad j = 1, \dots, n$$

$$V_i'(a) = \begin{cases} \frac{\alpha}{y_i} & \text{si } y_i \neq 0 \\ 0 & \text{si } y_i = 0 \end{cases}, \quad V_i'(b) = \begin{cases} \frac{\beta}{y_i} & \text{si } y_i \neq 0 \\ 0 & \text{si } y_i = 0 \end{cases}$$

(o las condiciones iniciales correspondientes al spline natural o knot a knot). En la figura 6 se muestra la gráfica de una de las funciones V_i .

Los splines cúbicos presentan múltiples ventajas frente a la interpolación clásica y otros métodos de aproximación: son manejables, fácilmente se pueden evaluar en un punto, integrar, derivar, calcular sus ceros, máximos y mínimos, etc. Además, de todas las curvas que pasan por un conjunto de puntos del

plano dado, son las que tienen menor curvatura. En concreto, si $U: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ es una función con derivada segunda continua satisfaciendo

$$U(x_i) = y_i, \quad i = 1, \dots, n$$

$U'(a) = \alpha, U'(b) = \beta$ entonces

$$\int_a^b U'''(x)^2 dx \geq \int_a^b S'''(x)^2 dx$$

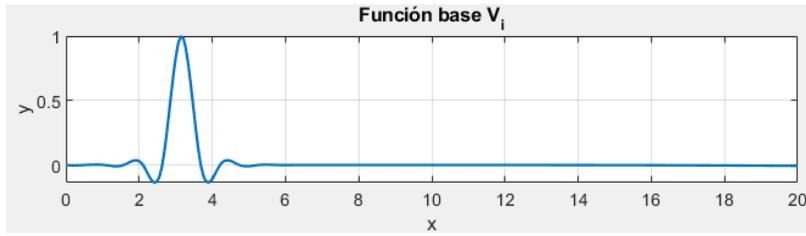


Figura 6. Gráfica típica de $x \rightarrow V_i(x)$

Sobre los splines cúbicos y sus tipos puede consultarse la referencia (Ascher y Greif, 2011).

3.2 Splines multidimensionales

La construcción de un spline cúbico mediante la expresión dada por (3.1) permite generalizar el concepto de spline a dimensiones mayores que uno. El *spline multidimensional de dimensión (N, m)* se construye de la siguiente forma:

dados

$$a_i = x_1^{(i)} < x_2^{(i)} < \dots < x_{n_i}^{(i)} = b_i, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

y escalares

$$z_{i_1, i_2, \dots, i_n, k} \in \mathbb{R}, \quad i_s = 1, 2, \dots, n_{i_s}, \quad s = 1, 2, \dots, n$$

si $x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ se define

$$S: [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times \dots \times [a_N, b_N] \subset \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^m$$

donde $S = (S_1, S_2, \dots, S_m)$ mediante

$$S_k(x) = \sum_{i_1=1}^{n_1} \sum_{i_2=1}^{n_2} \dots \sum_{i_N=1}^{n_N} z_{i_1, i_2, \dots, i_N, k} V_{k, i_1, 1}(x_1) V_{k, i_2, 2}(x_2) \dots V_{k, i_N, N}(x_N) \quad (3.2)$$

$$k = 1, 2, \dots, m$$

donde $V_{k, j, i}: [a_i, b_i] \rightarrow \mathbb{R}$ es el spline cúbico completo, natural o knot a knot que satisface

$$V_{k, j, i}(x_j^{(i)}) = \delta_{ij}, \quad j = 1, 2, \dots, n_i$$

El campo vectorial S es dos veces diferenciable por ser una combinación lineal de producto de funciones dos veces diferenciables, tiene derivadas parciales segundas continuas y satisface

$$S_k(x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_n}) = z_{i_1, i_2, \dots, i_n, k}$$

Obsérvese que se está trabajando con mallados multidimensionales rectangulares, donde los nodos no tienen que estar equiespaciados. Por construcción, considerando fijas las variables $x_1, x_2, \dots, x_{r-2}, x_{r+1}, \dots, x_N$, la función real

$$x_r \rightarrow S_k(x_1, x_2, \dots, x_{r-2}, x_r, x_{r+1}, \dots, x_N)$$

es un spline cúbico, por lo que minimiza la curvatura. Este hecho implica que, en cierto sentido, de todos los campos vectoriales que pasan por el conjunto de puntos determinado a partir del mallado multidimensional, es el spline dado por (3.2) es el que presenta “menor curvatura promedio”.

Se analiza ahora con un poco más de detalle el caso de los splines bidimensionales naturales: dados $a = x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$, $c = y_1 < y_2 < \dots < y_m = d$ y valores z_{ij} , $i = 1, 2, \dots, n$, $j = 1, 2, \dots, m$. Se define

$$S(x, y) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m z_{ij} V_i(x) W_j(y)$$

donde V_i es el spline cúbico que satisfice

$$V_i(x_k) = \delta_{ik}, \quad k = 1, \dots, n$$

con las condiciones iniciales $V_i''(a) = V_i''(b) = 0$

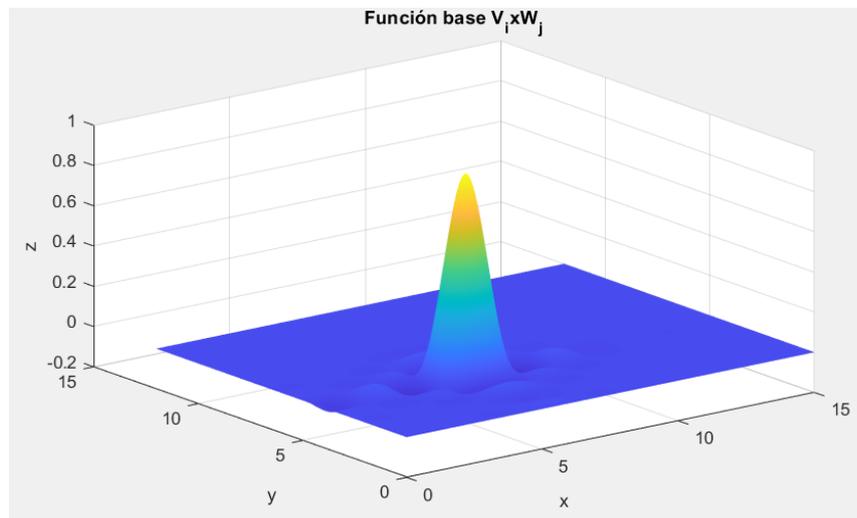


Figura 7. Gráfica típica de $(x, y) \rightarrow V_i(x)W_j(y)$

y donde W_j es el spline cúbico que satisfice

$$W_j(y_k) = \delta_{jk}, \quad k = 1, \dots, m$$

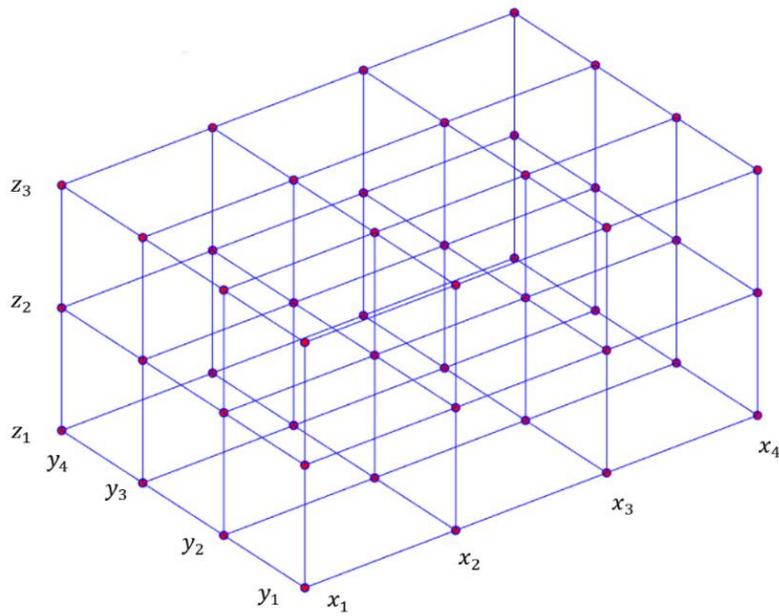


Figura 8. Ejemplo de malla tridimensional equiespaciado

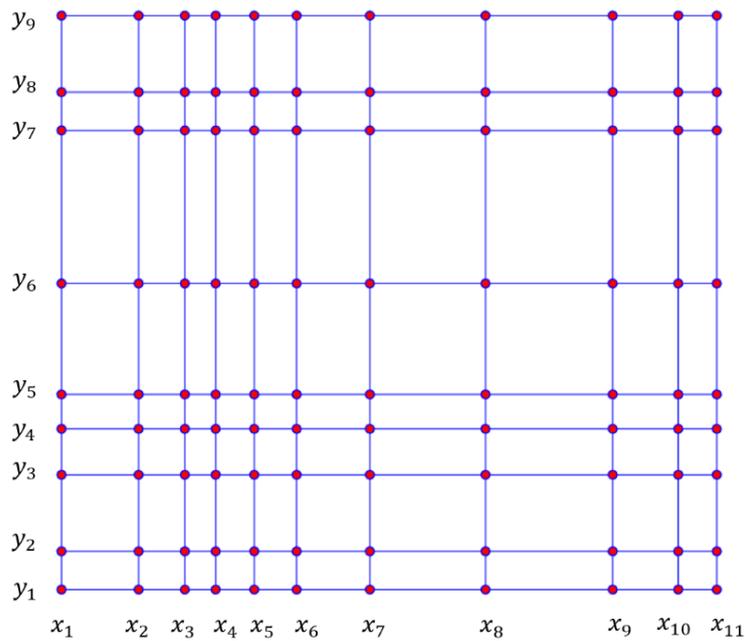


Figura 9. Ejemplo de malla bidimensional no equiespaciado

con las condiciones iniciales $W_j''(c) = W_j''(d) = 0$. La gráfica de la función $V_i(x)W_j(y)$ puede verse en la figura 7.

En el caso del spline bidimensional knot a knot las condiciones son las obvias. También es posible construir el spline completo con las condiciones iniciales

$$V_i'(a) = \alpha_1, V_i'(b) = \beta_1, W_j'(c) = \alpha_2, W_j'(d) = \beta_2$$

En cada uno de los rectángulos $[x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$ el spline cúbico bidimensional coincide con un polinomio bicúbico con variables

$$1, x, x^2, x^3, y, y^2, y^3, xy, xy^2, xy^3, x^2y, x^2y^2, x^2y^3, x^3y, x^3y^2, x^3y^3$$

Las figuras 8 y 9 muestran ejemplos de mallados tridimensional equiespaciado y bidimensional no equiespaciado.

Los splines cúbicos bidimensionales aproximan muy bien campos escalares y datos a partir de un mallado rectangular, donde los nodos no tienen que estar equiespaciados. Igual que ocurre con los splines unidimensionales la superficie resultante es continua de orden dos y tiene buenas propiedades geométricas (presentan pocas oscilaciones). Además, la propia función interpoladora tiene continuidad de clase C^2 y, al ser un polinomio en las variables x y y en cada uno de los rectángulos del mallado, es muy manejable. Al respecto se pueden seguir a (Habermann y Kindermann, 2007; Aymerich et al, 1985).

Nota: la técnica que se ha descrito en este apartado de la memoria puede adaptarse para aplicarse a dominios más complejos. Por ejemplo, en el caso de dimensión dos mostrado en la figura 10 el spline, conocidos los valores de z_{ij} en los nodos dados, quedaría descrito por

$$S(x, y) = \sum_{i=1}^5 \sum_{j=1}^4 z_{ij} V_i(x) W_j(y)$$

donde tomaríamos $z_{14} = z_{51} = 0$.

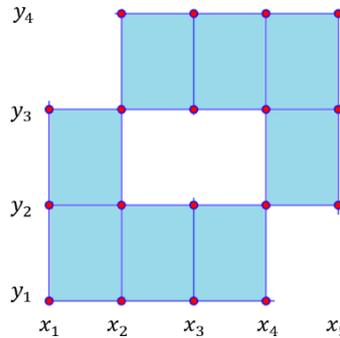


Figura 10. Ejemplo de mallado bidimensional incompleto.

3.3 Aproximación mínimo-cuadrática por splines de datos

El problema de mínimos cuadrados para splines cúbicos consiste en, dado un conjunto de puntos del plano $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^N$ con $a = x_1 < x_2 < \dots < x_N = b$ y valores $a = \tilde{x}_1 < \tilde{x}_2 < \dots < \tilde{x}_n = b$ con $n < N$, encontrar el spline $S: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ definido a partir de los puntos $\{(\tilde{x}_i, \tilde{y}_i)\}$, que minimiza

$$\sum_{k=1}^N (S(x_k) - y_k)^2$$

Se trata de encontrar los valores $\{\tilde{y}_i\}$ que hacen mínimo el campo escalar definido por

$$F(\tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \dots, \tilde{y}_n) := \sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=1}^n \tilde{y}_i V_i(x_k) - y_k \right)^2$$

donde V_i es el spline cúbico que satisface

$$V_i(\tilde{x}_j) = \delta_{ij}, \quad j = 0, 1, \dots, n$$

Estos valores se obtienen resolviendo el sistema de ecuaciones lineales

$$\frac{\partial F}{\partial \tilde{y}_j} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

esto es

$$\sum_{k=1}^N \left(\sum_{i=1}^n \tilde{y}_i V_i(x_k) - y_k \right) V_j(x_k) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

o, equivalentemente,

$$\sum_{i=1}^n \tilde{y}_i \left(\sum_{k=1}^N V_i(x_k) V_j(x_k) \right) = \sum_{k=1}^N y_k V_j(x_k), \quad j = 1, 2, \dots, n$$

Los splines mínimo-cuadráticos son particularmente útiles en el caso de aproximar datos que contienen variaciones aleatorias. Para más información sobre este tipo de splines pueden consultarse las referencias (Ascher y Greif, 2011; Aymerich et al, 1985; Green Y Silverman, 1994) .

El procedimiento anterior puede generalizarse para aproximar un conjunto de datos multivariantes por splines multidimensionales. Este trabajo se centra en el problema de mínimos cuadrados para splines cúbicos bidimensionales, que consiste, en dados

$$a = x_1 < x_2 < \dots < x_N = b, \quad c = y_1 < y_2 < \dots < y_M = d$$

y valores

$$\{z_{ij}: i = 1, 2, \dots, N, \quad j = 1, 2, \dots, M\}$$

encontrar el spline bidimensional $S: [a, b] \times [c, d] \rightarrow \mathbb{R}$ definido a partir de los valores $a = \tilde{x}_1 < \tilde{x}_2 < \dots < \tilde{x}_n = b$, $c = \tilde{y}_1 < \tilde{y}_2 < \dots < \tilde{y}_m = d$ y $\{z_{ij}: i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, m\}$ con $n < N$ y $m < M$ que minimiza

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M (S(x_i, y_j) - z_{ij})^2$$

Se trata entonces de encontrar los valores de $\{\tilde{z}_{rs}\}$ que hacen mínimo el campo escalar

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \left(\sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^m \tilde{z}_{rs} V_r(x_i) W_s(y_j) - z_{ij} \right)^2$$

donde V_r y W_s son los splines cúbico que satisfacen

$$V_r(\tilde{x}_i) = \delta_{ri}, \quad W_s(\tilde{y}_j) = \delta_{sj} \quad j = 0, 1, \dots, n$$

respectivamente.

Estos valores se obtienen resolviendo el sistema de $n \times m$ ecuaciones lineales

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(\sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^m \tilde{z}_{rs} V_r(x_i) W_s(y_j) - z_{ij} \right) V_R(x_i) W_S(y_j) = 0$$

$$R = 1, 2, \dots, n, \quad S = 1, 2, \dots, m$$

con $n \times m$ incógnitas \tilde{z}_{rs} o, equivalentemente,

$$\sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^m \tilde{z}_{rs} \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M V_r(x_i) W_s(y_j) V_R(x_i) W_S(y_j) \right) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M z_{ij} V_R(x_i) W_S(y_j)$$

$$R = 1, 2, \dots, n, \quad S = 1, 2, \dots, m$$

3.4 Aproximación numérica mediante splines multidimensionales de la ecuación del transporte de contaminantes

Se considera la ecuación en derivadas parciales dada por

$$\frac{\partial(AC)}{\partial t} + \frac{\partial(uAC)}{\partial x} = \frac{\partial \left(DA \frac{\partial C}{\partial x} \right)}{\partial x} + R \quad (3.3)$$

donde $C(t, x)$ es la concentración promediada en superficie, $A(t, x)$ es el área, t es el tiempo, x es la distancia, $u(t, x)$ es la componente de velocidad promediada en superficie, $D(t, x)$ es el coeficiente de dispersión en la dirección x y $R(t, x)$ es el término de reacción. Recordemos que la ecuación (3.3) es la forma unidimensional de la ecuación de advección-difusión promediada en superficie en la dirección x y permite estudiar la evolución de la concentración de una sustancia contaminante en un medio acuático.

En este apartado se muestra con detalle un procedimiento basado en el uso de splines bidimensionales junto con la técnica de mínimos cuadrados para el cálculo aproximado de la solución. Es esencialmente distinto de los métodos basados en splines de (Szymkiewicz, 1993; Maron y Gutierrez, 2013).

Es inmediato comprobar que (3.3) es equivalente a

$$DA \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) \frac{\partial C}{\partial x} - A \frac{\partial C}{\partial t} - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) C + R = 0 \quad (3.4)$$

Para calcular la solución aproximada en el intervalo $[0, T]$ para el tiempo y $[0, L]$ para el espacio se consideran valores

$$0 = t_1 < t_2 < \dots < t_n = T$$

$$0 = x_1 < x_2 < \dots < x_m = L$$

y se trata de encontrar una solución aproximada de (3.4) de la forma

$$C(t, x) := \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m c_{ij} V_i(t) W_j(x)$$

donde $V_i: [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ es el spline cúbico knot a knot que satisface

$$V_i(t_r) = \delta_{ir}, \quad r = 1, 2, \dots, n$$

y $W_j: [0, L] \rightarrow \mathbb{R}$ es el spline cúbico knot a knot que satisface

$$W_j(x_s) = \delta_{js}, \quad s = 1, 2, \dots, m$$

El objetivo es encontrar los valores c_{ij} que minimizan

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_0^L \left\{ DA \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m c_{ij} V_i W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m c_{ij} V_i W_j' - \right. \\ & \left. - A \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m c_{ij} V_i' W_j - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m c_{ij} V_i W_j + R \right\}^2 dt dx = \\ & = \int_0^T \int_0^L \left\{ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m c_{ij} \left[D A V_i W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_i W_j' - A V_i' W_j - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_i W_j \right] \right. \\ & \left. + R \right\}^2 dt dx \end{aligned} \quad (3.5)$$

3.4.1 Condiciones de tipo Dirichlet

Se estudia en primer lugar el caso en que las condiciones iniciales vienen dadas por

$$C(0, x) = C_0(x)$$

$$C(t, 0) = \alpha(t)$$

$$C(t, L) = \beta(t)$$

donde C_0 , α y β son funciones conocidas (condiciones de tipo Dirichlet). Es inmediato que

$$c_{1j} = C_0(x_j), \quad j = 1, 2, \dots, m$$

$$c_{i1} = \alpha(t_i), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$c_{im} = \beta(t_i), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Entonces (3.5) puede reescribirse de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
 & \int_0^T \int_0^L \left\{ \sum_{i=2}^n \sum_{j=2}^{m-1} c_{ij} \left[DAV_i W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_i W_j' - AV_i' W_j - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_i W_j \right] \right. \\
 & + \sum_{j=2}^{m-1} C_0(x_j) \left[DAV_1 W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_1 W_j' - AV_1' W_j \right. \\
 & \left. - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_1 W_j \right] \\
 & + \sum_{i=1}^n \alpha(t_i) \left[DAV_i W_1'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_i W_1' - AV_i' W_1 \right. \\
 & \left. - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_i W_1 \right] \\
 & + \sum_{i=1}^n \beta(t_i) \left[DAV_i W_m'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_i W_m' - AV_i' W_m \right. \\
 & \left. - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_i W_m \right] + R \left. \right\}^2 dt dx
 \end{aligned}$$

Hay que calcular

$$\min \{ F(c_{22}, c_{23}, \dots, c_{2,m-1}, \dots, c_{n2}, c_{n3}, \dots, c_{n,m-1}) \}$$

donde $F(c_{22}, c_{23}, \dots, c_{2,m-1}, \dots, c_{n2}, c_{n3}, \dots, c_{n,m-1})$ es el campo escalar anterior. Para ello se plantea el sistema de $(n-1)(m-2)$ ecuaciones lineales

$$\frac{\partial F}{\partial c_{IJ}} = 0 \quad I = 2, 3, \dots, n, \quad J = 2, 3, \dots, m-1$$

esto es

$$\begin{aligned}
 & \sum_{i=2}^n \sum_{j=2}^{m-1} c_{ij} \int_0^T \int_0^L \left[DAV_i W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_i W_j' - AV_i' W_j \right. \\
 & \left. - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_i W_j \right] \left[DAV_l W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_l W_j' - AV_l' W_j \right. \\
 & \left. - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_l W_j \right] dt dx =
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 = & \int_0^T \int_0^L \left\{ - \sum_{j=2}^{m-1} C_0(x_j) \left[DAV_1 W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_1 W_j' - AV_1' W_j \right. \right. \\
 & - \left. \left. \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_1 W_j \right] \right. \\
 & - \sum_{i=1}^n \alpha(t_i) \left[DAV_i W_1'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_i W_1' - AV_i' W_1 \right. \\
 & - \left. \left. \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_i W_1 \right] \right. \\
 & - \sum_{i=1}^n \beta(t_i) \left[DAV_i W_m'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_i W_m' - AV_i' W_m \right. \\
 & - \left. \left. \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_i W_m \right] - R \right\} \left\{ DAV_l W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_l W_j' \right. \\
 & \left. - AV_l' W_j - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_l W_j \right\} dt dx
 \end{aligned}$$

3.4.2 Condiciones de tipo Neumann

En el caso de condiciones iniciales de tipo Neumann como éstas

$$C(0, x) = C_0(x)$$

$$C(t, 0) = \alpha(t)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x}(t, L) = \beta(t)$$

se usa que

$$c_{1j} = C_0(x_j), j = 1, 2, \dots, m$$

$$c_{i1} = \alpha(t_i), i = 1, 2, \dots, n$$

El objetivo es encontrar los valores c_{ij} que minimizan

$$\begin{aligned}
 & \int_0^T \int_0^L \left\{ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m c_{ij} \left[DAV_i W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_i W_j' - AV_i' W_j - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_i W_j \right] \right. \\
 & \left. + R \right\}^2 dt dx + \int_0^T \left[\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m c_{ij} V_i(t) W_j'(x_m) - \beta(t) \right]^2 dt =
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 = & \int_0^T \int_0^L \left\{ \sum_{i=2}^n \sum_{j=2}^m c_{ij} \left[DAV_i W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_i W_j' - AV_i' W_j - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_i W_j \right] \right. \\
 & + \sum_{j=2}^m C_0(x_j) \left[DAV_1 W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_1 W_j' - AV_1' W_j \right. \\
 & \left. - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_1 W_j \right] \\
 & + \sum_{i=1}^n \alpha(t_i) \left[DAV_i W_1'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_i W_1' - AV_i' W_1 \right. \\
 & \left. - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_i W_1 \right] + R \left. \right\}^2 dt dx \\
 & + \int_0^T \left[\sum_{i=2}^n \sum_{j=2}^m c_{ij} V_i(t) W_j'(x_m) + \sum_{j=2}^m C_0(x_j) V_1(t) W_j'(x_m) + \sum_{i=1}^n \alpha(t_i) V_i(t) W_1'(x_m) \right. \\
 & \left. - \beta(t) \right]^2 dt
 \end{aligned}$$

Hay que calcular

$$\min \{ F(c_{22}, c_{23}, \dots, c_{2,m}, \dots, c_{n2}, c_{n3}, \dots, c_{n,m}) \}$$

donde $F(c_{22}, c_{23}, \dots, c_{2,m}, \dots, c_{n2}, c_{n3}, \dots, c_{n,m})$ es el campo escalar anterior. Para ello se considera el sistema de $(n-1)(m-1)$ ecuaciones lineales

$$\frac{\partial F}{\partial c_{IJ}} = 0 \quad I = 2, 3, \dots, n, \quad J = 2, 3, \dots, m$$

de donde se obtiene

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=2}^n \sum_{j=2}^m c_{ij} \int_0^T \int_0^L & \left[DAV_i W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_i W_j' - AV_i' W_j \right. \\
 & \left. - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_i W_j \right] \left[DAV_i W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_i W_j' - AV_i' W_j \right. \\
 & \left. - \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_i W_j \right] dt dx + \\
 & + \sum_{i=2}^n \sum_{j=2}^m c_{ij} \int_0^T V_i(t) W_j'(x_m) V_i(t) W_j'(x_m) dt =
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 = & \int_0^T \int_0^L \left\{ -R - \sum_{j=2}^m C_0(x_j) \left[DAV_1 W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_1 W_j' - AV_1' W_j \right. \right. \\
 & - \left. \left. \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_1 W_j \right] \right. \\
 & - \sum_{i=1}^n \alpha(t_i) \left[DAV_i W_1'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_i W_1' - AV_i' W_1 \right. \\
 & - \left. \left. \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_i W_1 \right] \right\} \left\{ DAV_l W_j'' + \left(\frac{\partial D}{\partial x} A + D \frac{\partial A}{\partial x} - uA \right) V_l W_j' - AV_l' W_j \right. \\
 & - \left. \left. \left(\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} A + u \frac{\partial A}{\partial x} \right) V_l W_j \right\} dt dx \\
 & + \int_0^T \left[- \sum_{j=2}^m C_0(x_j) V_1(t) W_j'(x_m) - \sum_{i=1}^n \alpha(t_i) V_i(t) W_1'(x_m) + \beta(t) \right] V_l(t) W_j'(x_m) dt
 \end{aligned}$$

3.4.3 Caso de estado estacionario

En el caso en que se produce un estado estacionario $\left(\frac{\partial C}{\partial t} = 0\right)$ y suponiendo que D, A, u y R dependen solo de x (3.4) se transforma en

$$DAC'' + (D'A + DA' - uA)C' - (u'A + uA')C + R = 0$$

Se aproxima la solución por

$$C(x) := \sum_{j=1}^m c_j W_j(x)$$

En el caso de condiciones iniciales de Dirichlet

$$C(0) = \alpha, C(L) = \beta \Rightarrow c_1 = \alpha, c_m = \beta$$

El objetivo es encontrar los valores c_j que minimizan

$$\begin{aligned}
 & \int_0^L \left[DA \sum_{j=1}^m c_j W_j'' + (D'A + DA' - uA) \sum_{j=1}^m c_j W_j' - (u'A + uA') \sum_{j=1}^m c_j W_j + R \right]^2 dt = \\
 & = \int_0^L \left[DA \sum_{j=2}^{m-1} c_j W_j'' + (D'A + DA' - uA) \sum_{j=2}^{m-1} c_j W_j' - (u'A + uA') \sum_{j=2}^{m-1} c_j W_j + R \right. \\
 & \quad + \alpha [DAW_1'' + (D'A + DA' - uA)W_1' - (u'A + uA')W_1] \\
 & \quad \left. + \beta [DAW_m'' + (D'A + DA' - uA)W_m' - (u'A + uA')W_m] \right]^2 dt
 \end{aligned}$$

Sea $F(c_2, c_3, \dots, c_{m-1})$ el campo escalar dado por la expresión anterior. Tiene que cumplirse

$$\frac{\partial F}{\partial c_j} = 0 \quad J = 2, 3, \dots, m-1$$

es decir

$$\begin{aligned} & \sum_{j=2}^{m-1} c_j \int_0^T [DAW_j'' + (D'A + DA' - uA)W_j' - (u'A + uA')W_j] [DAW_j'' + (D'A + DA' - uA)W_j' \\ & \quad - (u'A + uA')W_j] dt = \\ & = - \int_0^T \{R + \alpha[DAW_1'' + (D'A + DA' - uA)W_1' - (u'A + uA')W_1] \\ & \quad + \beta[DAW_m'' + (D'A + DA' - uA)W_m' - (u'A + uA')W_m]\} \{DAW_j'' \\ & \quad + (D'A + DA' - uA)W_j' - (u'A + uA')W_j\} dt \end{aligned}$$

Trabajando con las condiciones iniciales de Neumannn: $C'(0) = \alpha$, $C'(L) = \beta$ hay que calcular los valores de c_j que minimizan

$$\begin{aligned} & \int_0^L \left[DA \sum_{j=1}^m c_j W_j'' + (D'A + DA' - uA) \sum_{j=1}^m c_j W_j' - (u'A + uA') \sum_{j=1}^m c_j W_j + R \right]^2 dt \\ & \quad + \left(\sum_{j=1}^m c_j W_j'(0) - \alpha \right)^2 + \left(\sum_{j=1}^m c_j W_j'(L) - \beta \right)^2 \end{aligned}$$

Sea $F(c_1, c_2, \dots, c_m)$ el campo escalar dado por la expresión anterior. Tiene que cumplirse

$$\frac{\partial F}{\partial c_j} = 0 \quad J = 1, 2, \dots, m$$

de donde se deduce que

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^m c_j \left\{ \int_0^T [DAW_j'' + (D'A + DA' - uA)W_j' - (u'A + uA')W_j] [DAW_j'' + (D'A + DA' - uA)W_j' \right. \\ & \quad \left. - (u'A + uA')W_j] dt + W_j'(0)W_j'(0) + W_j'(L)W_j'(L) \right\} dt \\ & = - \int_0^T R [DAW_j'' + (D'A + DA' - uA)W_j' - (u'A + uA')W_j] dt + \alpha W_j'(0) \\ & \quad + \beta W_j'(L) \end{aligned}$$

3.4.4 La ecuación del transporte tridimensional

El método que se ha descrito también puede utilizarse en los casos bidimensional (2.2) y tridimensional (2.1). El procedimiento en este último caso consiste, fijado un mallado (t_i, x_j, y_k, z_l) del prisma rectangular cuadrimensional $[0, T] \times [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$, aproximar la solución de

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial(u_x C)}{\partial x} + \frac{\partial(u_y C)}{\partial y} + \frac{\partial(u_z C)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + R \quad (3.6)$$

por una función que tenga la forma

$$C(t, x, y, z) := \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_2} \sum_{k=1}^{n_3} \sum_{l=1}^{n_4} c_{ijkl} V_i(t) W_j(x) P_k(y) Q_l(z) \quad (3.7)$$

donde $V_i: [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ es el spline cúbico knot a knot que satisface

$$V_i(t_s) = \delta_{is}, \quad s = 1, 2, \dots, n_1$$

$W_j: [0, L_x] \rightarrow \mathbb{R}$ es el spline cúbico knot a knot que satisface

$$W_j(x_s) = \delta_{js}, \quad s = 1, 2, \dots, n_2$$

$P_k: [0, L_y] \rightarrow \mathbb{R}$ es el spline cúbico knot a knot que satisface

$$P_k(y_t) = \delta_{ks}, \quad s = 1, 2, \dots, n_3$$

y $Q_l: [0, L_z] \rightarrow \mathbb{R}$ es el spline cúbico knot a knot que satisface

$$Q_l(z_s) = \delta_{ls}, \quad s = 1, 2, \dots, n_4$$

Los coeficientes c_{ijkl} se calculan minimizando el campo escalar

$$\tilde{C} \rightarrow \int_0^T \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} \int_0^{L_z} G(t, x, y, z, \tilde{C})^2 dt dx dy dz$$

donde $\tilde{C} = (c_{ijkl})$ y $G(t, x, y, z, \tilde{C})$ es la función resultante de utilizar la expresión de C dada por (3.7) en (3.6).

4. DESARROLLO DE FUNCIONES Y HERRAMIENTAS INFORMÁTICAS APP DESGINER DE MATLAB

En este capítulo se presenta con detalle los programas de los distintos algoritmos descritos en el capítulo 3 de esta memoria. Se trata de funciones de Matlab y apps diseñadas con la herramienta *App Designer* (MATHWORKS, 2021). Respecto de estas últimas hemos diseñado aplicaciones informáticas (interfaces gráficas de usuario) para el tratamiento de datos mediante el uso de los splines cúbicos bidimensionales (**splines2D.mlapp**) y tridimensionales (**splines3D.mlapp**), splines cúbicos de mínimos cuadrados de dimensiones uno (**splinesMC.mlapp**) y dos (**splinesBMC.mlapp**) y la resolución aproximada de la ecuación del transporte de contaminantes (**transporteSPLI.mlapp**). Además, también se desarrolla la aplicación **PVIspline.mlapp** que permite resolver, a partir de la técnica de splines cúbicos y mínimos cuadrados, problemas de valores iniciales de segundo orden lineales y, en particular, el caso estacionario de la ecuación del transporte.

El objetivo es presentar mediante una interfaz sencilla, atractiva, fácil de utilizar, amigable y que no requiere de conocimientos especiales de programación, un software para su utilización en el tratamiento de datos de problemas relativos a la contaminación y en la resolución aproximada de las ecuaciones en derivadas parciales que modelizan el comportamiento de contaminantes en medios acuáticos. En todos los casos también se presta especialmente atención a la visualización de los resultados obtenidos.

De todas estas aplicaciones se han obtenido versiones ejecutables y, en un futuro, versiones web que no necesitan de tener Matlab instalado en el ordenador donde se estén trabajando.

4.1 Funciones de Matlab

Se describe a continuación las funciones principales que se han programado para trabajar con los **splines bidimensionales**:

- **Z = spline2Dk(x, y, z, X, Y)**

Evalúa el spline bidimensional knot a knot en un conjunto de puntos del plano.

x vector con los nodos x_i correspondientes al eje X

y vector con los nodos y_j correspondientes al eje Y

z matriz con los valores z_{ij} correspondientes al punto (x_i, y_j)

X vector con los nodos X_i correspondientes al eje X en que se desea evaluar el spline

Y vector con los nodos Y_j correspondientes al eje Y en que se desea evaluar el spline

Z matriz con los valores $Z_{ij} = S(X_i, Y_j)$

- **Z = spline2Dn(x, y, z, X, Y)**

Evalúa el spline bidimensional natural en un conjunto de puntos del plano.

x vector con los nodos x_i correspondientes al eje X

y vector con los nodos y_j correspondientes al eje Y

z matriz con los valores z_{ij} correspondientes al punto (x_i, y_j)

X vector con los nodos X_i correspondientes al eje X en que se desea evaluar el spline

Y vector con los nodos Y_j correspondientes al eje Y en que se desea evaluar el spline

- **Z** matriz con los valores $Z_{ij} = S(X_i, Y_j)$
- **Z = spline2Dc(alfa1, alfa2, beta1, beta2, x1, y1, z, X, Y)**
Evalúa el spline bidimensional completo en un conjunto de puntos del plano.
x1 vector con los nodos x_i correspondientes al eje X
y1 vector con los nodos y_j correspondientes al eje Y
z matriz con los valores z_{ij} correspondientes al punto (x_i, y_j)
alfa1 valor de la derivada parcial respecto de x en el extremo izquierda
beta1 valor de la derivada parcial respecto de x en el extremo derecha
alfa2 valor de la derivada parcial respecto de y en el extremo izquierda
beta2 valor de la derivada parcial respecto de y en el extremo derecha
X vector con los nodos X_i correspondientes al eje X en que se desea evaluar el spline
Y vector con los nodos Y_j correspondientes al eje Y en que se desea evaluar el spline
Z matriz con los valores $Z_{ij} = S(X_i, Y_j)$

Para splines tridimensionales tenemos:

- **[w, wf] = splines3DT(F, x1, y1, z1, X, Y, Z)**

Calcula el spline tridimensional knot a knot que pasa por un conjunto de puntos del espacio con valores dados por un campo escalar.

- **x1** vector con los nodos x_i correspondientes al eje X
- **y1** vector con los nodos y_j correspondientes al eje Y
- **z1** vector con los nodos z_k correspondientes al eje Z
- **F** expresión en las variables x y z del campo escalar
- **X** vector con los nodos X_i correspondientes al eje X en que se desea evaluar el spline
- **Y** vector con los nodos Y_j correspondientes al eje Y en que se desea evaluar el spline
- **Z** vector con los nodos Z_k correspondientes al eje Z en que se desea evaluar el spline
- **w** Hipermatriz con los valores $w_{ijk} = S(X_i, Y_j, Z_k)$ (arreglo multidimensional) siendo S el spline knot a knot 3-dimensional que pasa por los puntos (x_i, y_j, z_k) tomando los valores $F(x_i, y_j, z_k)$.
- **wf** Hipermatriz con los valores $w_{ijk} = F(x_i, y_j, z_k)$ (arreglo multidimensional).

- **w = splines3DTM(x1, y1, z1, v, X, Y, Z)**

Calcula el spline tridimensional knot a knot que pasa por un conjunto de puntos del espacio con valores dados.

- **x1** vector con los nodos x_i correspondientes al eje X
- **y1** vector con los nodos y_j correspondientes al eje Y
- **z1** vector con los nodos z_k correspondientes al eje Z
- **X** vector con los nodos X_i correspondientes al eje X en que se desea evaluar el spline
- **Y** vector con los nodos Y_j correspondientes al eje Y en que se desea evaluar el spline
- **Z** vector con los nodos Z_k correspondientes al eje Z en que se desea evaluar el spline
- **v** hipermatriz con los valores v_{ijk} (arreglo multidimensional) correspondiente a los puntos (x_i, y_j, z_k) .
- **w** hipermatriz con los valores $w_{ijk} = S(X_i, Y_j, Z_k)$ (arreglo multidimensional) siendo S el spline knot a knot 3-dimensional que pasa por los puntos (x_i, y_j, z_k) tomando los valores v_{ijk} .

Para **splines de mínimos cuadrados** tenemos:

- **[X,Z,Z1,Ze,u] = mcsplif_aux(f,x,A,x_,a,b,tipo)**

Calcula el spline cúbico de mínimos cuadrados y el polinomio de mínimos cuadrados que aproximan a una función dada.

f expresión en la variable x que recoge a la función a aproximar

x vector con los nodos x_i (abscisas)

x_ vector con los nodos \tilde{x}_i utilizados para calcular el spline y el polinomio.

A Amplitud. Si vale 0 se consideran los puntos $(x_i, f(x_i))$ y si es un valor positivo se consideran los puntos $(x_i, f(x_i) - A + 2A \text{ rand})$ (se modifican aleatoriamente los valores $f(x_i)$).

a valor de la derivada en el extremo izquierdo si se elige el spline completo

b valor de la derivada en el extremo derecho si se elige el spline completo

tipo si toma el valor 1 se trabaja con el spline knot a knot, si se toma 2 con el spline natural y 3 con el spline completo

x vector de abscisas X_i utilizado para calcular las aproximaciones

Z vector con los valores del spline de mínimos cuadrados en **x**

Z1 vector con los valores del polinomio de mínimos cuadrados en **x**

Ze vector con los valores $F(X_i)$

u matriz con los valores $(x_i, F(x_i))$

- **[X,Z,Z1] = mcsplid_aux(u,x_,a,b,tipo)**

Calcula el spline cúbico de mínimos cuadrados y el polinomio de mínimos cuadrados que aproximan a un conjunto de puntos dados.

u matriz que recoge los puntos del plano dados

x_ vector con los nodos \tilde{x}_i utilizados para calcular el spline y el polinomio.

a valor de la derivada en el extremo izquierdo si se elige el spline completo

b valor de la derivada en el extremo derecho si se elige el spline completo

tipo si toma el valor 1 se trabaja con el spline knot a knot, si se toma 2 con el spline natural y 3 con el spline completo

x vector de abscisas utilizado para calcular las aproximaciones

Z vector con los valores del spline de mínimos cuadrados en **x**

Z1 vector con los valores del polinomio de mínimos cuadrados en **x**

- **[X1,Y1,Z1,Ze,z_,Z] = bmcsplif_aux(f,X,Y,A,x_,y_)**

Calcula el spline cúbico bidimensional de mínimos cuadrados que aproxima a la función dada a partir de ciertos nodos.

f expresión en las variables x e y que recoge a la función f a aproximar

x vector con las abscisas x_i de los puntos del plano dados

Y vector con las ordenadas y_j de los puntos del plano dados

A Amplitud. Si vale 0 se consideran los puntos $(x_i, y_j, f(x_i, y_j))$ y si es un valor positivo se consideran los puntos $(x_i, y_j, f(x_i, y_j) - A + 2A \text{ rand})$ (se modifican aleatoriamente los valores $f(x_i)$)

x_ vector con las abscisas \tilde{x}_i de los nodos utilizados para calcular el spline

y_ vector con las ordenadas \tilde{y}_i de los nodos utilizados para calcular el spline

Z matriz con las entradas modificadas aleatoriamente de $f(x_i, y_j)$

X1 vector de abscisas X_i utilizado para calcular las aproximaciones

Y1 vector de ordenadas Y_j utilizado para calcular las aproximaciones

Z1 matriz con las entradas $Z_{ij} = S(X_i, Y_j)$

ze matriz con las entradas $F(X_i, Y_j)$

z_ matriz de entradas \tilde{z}_{ij} usadas por el spline bidimensional

- `[X1,Y1,Z1,z_] = bmcsplim_aux(X,Y,Z,x_,y_)`

x vector con las abscisas x_i de los puntos del plano dados

y vector con las ordenadas y_j de los puntos del plano dados

z matriz con los valores z_{ij} correspondientes a (x_i, y_j) .

x_ vector con las abscisas \tilde{x}_i de los nodos utilizados para calcular el spline

y_ vector con las ordenadas \tilde{y}_i de los nodos utilizados para calcular el spline

x1 vector de abscisas X_i utilizado para calcular las aproximaciones

y1 vector de ordenadas Y_j utilizado para calcular las aproximaciones

z1 matriz con las entradas $Z_{ij} = S(X_i, Y_j)$

z_ matriz de entradas \tilde{z}_{ij} usadas por el spline bidimensional

También se han programado las siguientes funciones para implementar el método de **splines bidimensionales con mínimos cuadrados** para resolver de forma aproximada la ecuación en derivadas parciales del transporte de contaminantes o ecuación de advección-difusión (3.4):

- `u = transporte1_aux(alfa,beta,C0,R,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx)`

Aplica el método de splines bidimensionales a la ecuación del transporte para $(t, x) \in [0, T] \times [0, L]$ con condiciones de Dirichlet supuesto conocidas las distintas funciones.

tt es un vector ordenado con nodos t_i en $[0, T]$ (incluyendo a 0 y T)

xx es un vector ordenado con nodos x_j en $[0, L]$ (incluyendo a 0 y L)

A expresión correspondiente a $A(t, x)$

dtA expresión correspondiente a $\frac{\partial A}{\partial t}(t, x)$

dxA expresión correspondiente a $\frac{\partial A}{\partial x}(t, x)$

U expresión correspondiente a $U(t, x)$

dxU expresión correspondiente a $\frac{\partial U}{\partial x}(t, x)$

D expresión correspondiente a $D(t, x)$

dxD expresión correspondiente a $\frac{\partial D}{\partial x}(t, x)$

R expresión correspondiente a $R(t, x)$

C0 expresión que recoge a $C(0, x)$ (conocido)

alfa expresión que recoge a $C(t, 0)$ (conocido)

beta expresión que recoge a $C(t, L)$ (conocido)

u matriz que recoge a los valores u_{ij} que aproximan a $C(t_i, x_j)$.

- `C = transporte2_aux(alfa,beta,C0,R,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx)`

Aplica el método de splines bidimensionales a la ecuación del transporte para $(t, x) \in [0, T] \times [0, L]$ con condiciones de Neumann supuesto conocidas las distintas funciones.

tt es un vector ordenado con nodos t_i en $[0, T]$ (incluyendo a 0 y T)

xx es un vector ordenado con nodos x_j en $[0, L]$ (incluyendo a 0 y L)

A expresión correspondiente a $A(t, x)$

dtA expresión correspondiente a $\frac{\partial A}{\partial t}(t, x)$

dxA expresión correspondiente a $\frac{\partial A}{\partial x}(t, x)$

U expresión correspondiente a $U(t, x)$

dxU expresión correspondiente a $\frac{\partial U}{\partial x}(t, x)$
D expresión correspondiente a $D(t, x)$
dxD expresión correspondiente a $\frac{\partial D}{\partial x}(t, x)$
R expresión correspondiente a $R(t, x)$
C0 expresión que recoge a $C(0, x)$ (conocido)
alfa expresión que recoge a $C(t, 0)$ (conocido)
beta expresión que recoge a $\frac{\partial C}{\partial x}(t, L)$ (conocido)
C matriz que recoge a los valores c_{ij} que aproximan a $C(t_i, x_j)$

- **C = transporte3_aux(alfa,beta,C0,R,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx)**

Aplica el método de splines bidimensionales a la ecuación del transporte para $(t, x) \in [0, T] \times [0, L]$ con condiciones de Dirichlet.

tt es un vector ordenado con nodos t_i en $[0, T]$ (incluyendo a 0 y T)

xx es un vector ordenado con nodos x_j en $[0, L]$ (incluyendo a 0 y L)

A matriz con los valores $A(t_i, x_j)$

dtA matriz con los valores $\frac{\partial A}{\partial t}(t_i, x_j)$

dxA matriz con los valores $\frac{\partial A}{\partial x}(t_i, x_j)$

U matriz con los valores $U(t_i, x_j)$

dxU matriz con los valores $\frac{\partial U}{\partial x}(t_i, x_j)$

D matriz con los valores $D(t_i, x_j)$

dxD matriz con los valores $\frac{\partial D}{\partial x}(t_i, x_j)$

R matriz con los valores $R(t_i, x_j)$

C0 vector con los valores $C(0, x_j)$ (conocido)

alfa vector con los valores $C(t_i, 0)$ (conocido)

beta vector con los valores $C(t_i, L)$ (conocido)

C matriz que recoge a los valores c_{ij} que aproximan a $C(t_i, x_j)$

- **C = transporte4_aux(alfa,beta,C0,R,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx)**

Aplica el método de los splines bidimensionales a la ecuación del transporte para $(t, x) \in [0, T] \times [0, L]$ con condiciones de Neumann.

tt es un vector ordenado con nodos t_i en $[0, T]$ (incluyendo a 0 y T)

xx es un vector ordenado con nodos x_j en $[0, L]$ (incluyendo a 0 y L)

A matriz con los valores $A(t_i, x_j)$

dtA matriz con los valores $\frac{\partial A}{\partial t}(t_i, x_j)$

dxA matriz con los valores $\frac{\partial A}{\partial x}(t_i, x_j)$

U matriz con los valores $U(t_i, x_j)$

dxU matriz con los valores $\frac{\partial U}{\partial x}(t_i, x_j)$

D matriz con los valores $D(t_i, x_j)$

dxD matriz con los valores $\frac{\partial D}{\partial x}(t_i, x_j)$

R matriz con los valores $R(t_i, x_j)$

C0 vector con los valores $C(0, x_j)$ (conocido)

alfa vector con los valores $C(t_i, 0)$ (conocido)

beta vector con los valores $\frac{\partial C}{\partial x}(t_i, L)$ (conocido)

C matriz que recoge a los valores c_{ij} que aproximan a $C(t_i, x_j)$

- **C = metDF(alfa, beta, C0, R, A, dtA, dxA, U, dxU, D, dxD, tt, xx)**

Aplica el método de las diferencias finitas a la ecuación del transporte para $(t, x) \in [0, T] \times [0, L]$

tt es un vector ordenado con nodos t_i equiespaciados en $[0, T]$ (incluyendo a 0 y T)

xx es un vector ordenado con nodos x_j equiespaciados en $[0, L]$ (incluyendo a 0 y L)

A expresión correspondiente a $A(t, x)$

dtA expresión correspondiente a $\frac{\partial A}{\partial t}(t, x)$

dxA expresión correspondiente a $\frac{\partial A}{\partial x}(t, x)$

U expresión correspondiente a $U(t, x)$

dxU expresión correspondiente a $\frac{\partial U}{\partial x}(t, x)$

D expresión correspondiente a $D(t, x)$

dxD expresión correspondiente a $\frac{\partial D}{\partial x}(t, x)$

R expresión correspondiente a $R(t, x)$

C0 expresión que recoge a $C(0, x)$ (conocido)

alfa expresión que recoge a $C(t, 0)$ (conocido)

beta expresión que recoge a $\frac{\partial C}{\partial x}(t, L)$ (conocido)

C matriz que recoge a los valores c_{ij} que aproximan a $C(t_i, x_j)$.

Finalmente, la siguiente función implementa el método de los splines con **mínimos cuadrados para resolver aproximadamente problemas de valores iniciales lineales de 2º orden**

$$A(x)y''(x) + B(x)y'(x) + C(x)y(x) + D(x) = 0 \quad (4.1)$$

con condiciones de Dirichlet

$$y(a) = \alpha, y(b) = \beta$$

o de Neumann

$$y'(a) = \alpha, y'(b) = \beta$$

- **[X, Z] = spedo(A, B, C, D, a, alfa, b, beta, x)**

Aplica el método de los splines cúbicos al PVI con las condiciones de Dirichlet en un intervalo dado $[a, b]$

A expresión en la variable x que recoge a $A(x)$

B expresión en la variable x que recoge a $B(x)$

C expresión en la variable x que recoge a $C(x)$

D expresión en la variable x que recoge a $D(x)$

a extremo izquierda del intervalo

Alfa valor de $y(a)$

b extremo derecha del intervalo

beta valor de $y(b)$

x es un vector ordenado con nodos x_i en $[a, b]$ usados para evaluar el spline

Z es un vector ordenado con los valores del spline en los nodos x_i

- **[X,Z] = spedoN(A,B,C,D,a,alfa,b,beta,x)**

Aplica el método de los splines cúbicos al PVI con las condiciones de Neumann en un intervalo dado $[a, b]$

A expresión en la variable x que recoge a $A(x)$

B expresión en la variable x que recoge a $B(x)$

C expresión en la variable x que recoge a $C(x)$

D expresión en la variable x que recoge a $D(x)$

a extremo izquierda del intervalo

Alfa valor de $y'(a)$

b extremo derecha del intervalo

beta valor de $y'(b)$

x es un vector ordenado con nodos x_i en $[a, b]$ usados para evaluar el spline

z es un vector ordenado con los valores del spline en los nodos x_i

- **[X,Z] = spedoM(A_,B_,C_,D_,a,alfa,b,beta,x)**

Aplica el método de los splines cúbicos al PVI con las condiciones de Dirchlet en un intervalo dado $[a, b]$

A vector con los valores $A(\tilde{x}_i)$

B vector con los valores $B(\tilde{x}_i)$

C vector con los valores $C(\tilde{x}_i)$

D vector con los valores $D(\tilde{x}_i)$

a extremo izquierda del intervalo

alfa valor de $y(a)$

b extremo derecha del intervalo

beta valor de $y(b)$

x es un vector con los nodos \tilde{x}_i que determinan el spline

X es un vector ordenado con nodos x_i en $[a, b]$ usados para evaluar el spline

Z es un vector ordenado con los valores del spline en los nodos x_i

- **[X,Z] = spedoNM(A_,B_,C_,D_,a,alfa,b,beta,x)**

Aplica el método de los splines cúbicos al PVI con las condiciones de Neumann en un intervalo dado $[a, b]$

A vector con los valores $A(\tilde{x}_i)$

B vector con los valores $B(\tilde{x}_i)$

C vector con los valores $C(\tilde{x}_i)$

D vector con los valores $D(\tilde{x}_i)$

a extremo izquierda del intervalo

alfa valor de $y'(a)$

b extremo derecha del intervalo

beta valor de $y'(b)$

x es un vector con los nodos \tilde{x}_i que determinan el spline

X es un vector ordenado con nodos x_i en $[a, b]$ usados para evaluar el spline

Z es un vector ordenado con los valores del spline en los nodos x_i

4.2 App para splines bidimensionales

La aplicación que se ha diseñado, `splinesBID.mlapp`, se muestra en la figura 11. Los parámetros de entrada son los siguientes:

- **Tipo de entrada:** Desplegable a elegir entre *Función*, *matriz de puntos* y *excel*.
- **Función:** Expresión del campo escalar a aproximar en las variables x e y .
- **Puntos:** Matriz que recoge los valores z_{ij} correspondientes a los nodos x_i e y_j . Solo se usa si se ha tomado *matriz de puntos* como tipo de entrada.
- **Derivadas eje X:** Solo se usa si se ha tomado *Función* como tipo de entrada.

α_1 valor de $\frac{\partial f}{\partial x}$ en x_1 para cualquier y

β_1 valor de $\frac{\partial f}{\partial x}$ en x_n para cualquier y

- **Derivadas eje Y:** Solo se usa si se ha tomado *Función* como tipo de entrada.

α_2 valor de $\frac{\partial f}{\partial y}$ en y_1 para cualquier x

β_2 valor de $\frac{\partial f}{\partial y}$ en y_m para cualquier x

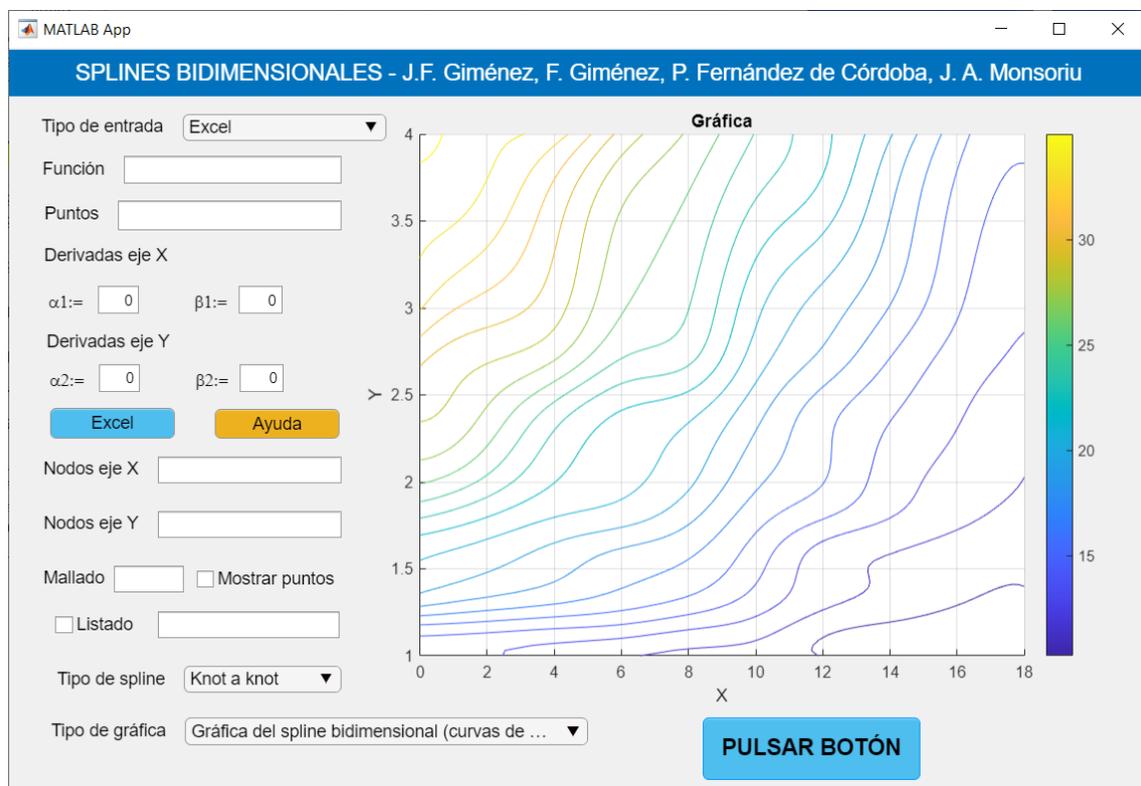


Figura 11. El laboratorio virtual splinesBID (ver ejemplo 5.1.5)

- **Nodos eje X:** Vector con los nodos x_i correspondientes al eje X. Solo se usa si se ha tomado *Función* o *matriz de puntos* como tipo de entrada.
- **Nodos eje Y:** Vector con los nodos y_j correspondientes al eje Y. Solo se usa si se ha tomado *Función* o *matriz de puntos* como tipo de entrada.
- **Mallado:** Vector de la forma $[N_1, N_2]$ con valores enteros positivos que indican el número de nodos en x e y usados en los gráficos de resultados. Si se deja vacío se utilizan 100 nodos en ambos casos.
- **Mostrar puntos:** si se selecciona se muestran los puntos en las gráficas generadas
- **Listado:** Si se selecciona y se pone el nombre “*lista*”, por ejemplo, se genera el fichero de texto *lista.txt* que recoge los valores

$$a_{00}, a_{10}, a_{01}, a_{20}, a_{11}, a_{02}, a_{30}, a_{21}, a_{12}, a_{03}, a_{31}, a_{22}, a_{13}, a_{32}, a_{23}, a_{33}$$

correspondientes a la expresión del spline bidimensional

$$a_{00} + a_{10}(x - x_i) + a_{01}(y - y_j) + a_{20}(x - x_i)^2 + a_{11}(x - x_i)(y - y_j) + a_{02}(y - y_j)^2 + a_{30}(x - x_i)^3 + a_{21}(x - x_i)^2(y - y_j) + a_{12}(x - x_i)(y - y_j)^2 + a_{03}(y - y_j)^3 + a_{31}(x - x_i)^3(y - y_j) + a_{22}(x - x_i)^2(y - y_j)^2 + a_{13}(x - x_i)(y - y_j)^3 + a_{32}(x - x_i)^3(y - y_j)^2 + a_{23}(x - x_i)^2(y - y_j)^3 + a_{33}x(x - x_i)^3(y - y_j)^3$$

en cada uno de los rectángulos $[x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$.

- **Desplegable con opciones de tipo de spline:** *Knot a knot*, *Natural* y *Completo*.
- **Desplegable con opciones gráficas:** *gráfica del spline bidimensional (superficie)*, *gráfica del spline bidimensional (seudocolor)*, *gráfica del spline bidimensional (curvas de nivel)*, *gráfica del error (superficie)* y *gráfica del error (seudocolor)*. Estas dos últimas solo se usan si se ha seleccionado como tipo de entrada *Función*.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1		1	1,2	1,3	1,6	1,8	2	2,4	2,7	3	3,5	4
2	0	14	16	18,4	21	23,4	26	28,7	30	32,5	34	36,3
3	2	13	15,5	17,5	20,1	22	24,2	27	28,6	30,5	33	34
4	4	12,4	15	16,8	19	20,7	22	24	27,2	29	30,2	33
5	6	11,7	14,5	16	17,9	20	21	21,9	24,5	26	27	29,4
6	8	11,3	13,6	15	17	18,4	19,6	21	23,5	24,6	25,5	27
7	10	11	12,6	13,5	14,9	16	17	18,5	20	21	22,8	24,5
8	12	10,2	11	11,8	12,4	14,3	15,5	16	17,7	18,8	21	22,3
9	14	9,8	10,3	11,1	11,6	12,9	13,5	14,3	15,4	16,7	18	19,5
10	16	9,3	9,7	10,3	11	11,9	12,4	13	13,6	14,3	15	16
11	18	9	9,5	10	10,4	10,9	11,5	11,9	12,6	13	13,6	14,5
12												
13												

Figura 12. Formato fichero de Excel para splinesBID y splinesBMC.

Si se pulsa el botón *Seleccionar Excel* (y se ha elegido *Excel* como tipo de entrada) se abre una ventana en donde es posible seleccionar el fichero de excel que contiene los datos a utilizar para los cálculos. El fichero tiene que contener los datos organizados como muestra la figura 12.

Si se pulsa *Ayuda* se muestra un documento pdf con indicaciones de cómo hay que usar la aplicación. El botón *Pulsar Botón* genera los resultados gráficos.

4.3 App para splines tridimensionales

Se trata de la aplicación `splines3D.mlapp` que se muestra en la figura 13. Los parámetros de entrada son los siguientes:

- **Tipo de entrada:** Desplegable a elegir entre *Función*, *Matriz de puntos* y *Excel*.
- **Función:** Expresión del campo escalar a aproximar en las variables x , y y t .
- **Puntos:** Matriz que recoge los valores z_{ijk} correspondientes a los nodos x_i , y_j y t_k . Esta matriz debe de construirse de la siguiente manera: se colocan las matrices (z_{ij1}) , (z_{ij2}) , ..., en bloques de columnas. Solo se usa si se ha tomado *Matriz de puntos* como tipo de entrada.
- **Nodos eje X:** Vector con los nodos x_i correspondientes al eje X. Solo se usa si se ha tomado *Función* o *Matriz de puntos* como tipo de entrada.
- **Nodos eje Y:** Vector con los nodos y_j correspondientes al eje Y. Solo se usa si se ha tomado *Función* o *Matriz de puntos* como tipo de entrada.
- **Nodos eje T:** Vector con los nodos t_k correspondientes al eje T. Solo se usa si se ha tomado *Función* o *Matriz de puntos* como tipo de entrada.

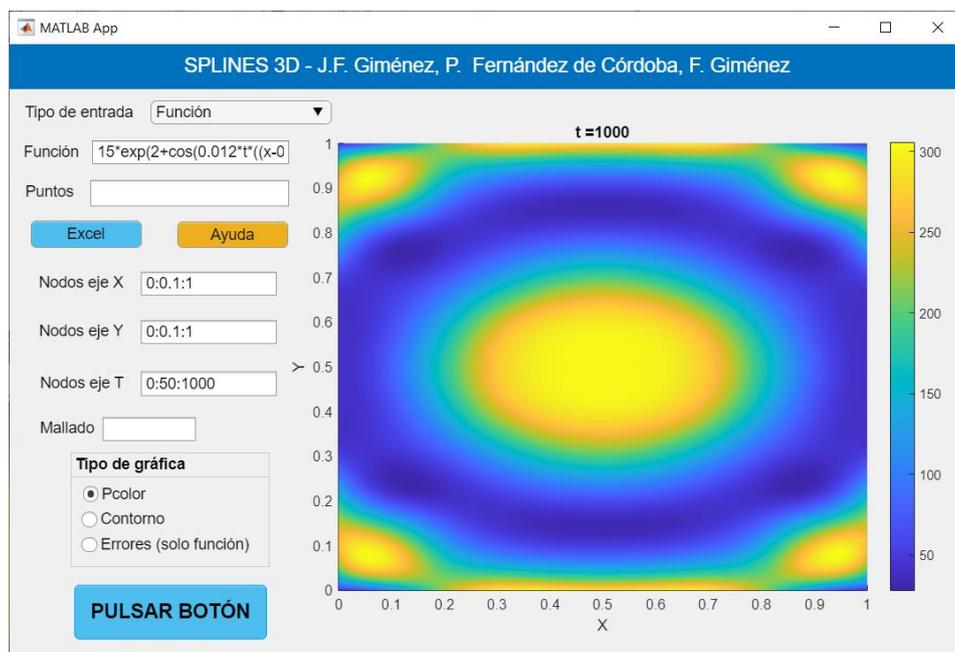


Figura 13. El laboratorio virtual splines3D

	A	B	C	D	E	F
1	69,5	69,4	68,9	69,4	69,5	
2	69	71,8	66,1	73	70,9	
3	66,6	60,4	70,2	79,8	72,5	
4	69,4	69,9	72,4	70,3	69,6	
5	69,5	69,5	69,5	69,5	69,5	
6						
7	69,5	69,4	69,2	69,5	69,5	
8	69,1	71,4	63,6	72,6	69,7	
9	61,4	67,4	69,4	84,9	70,5	
10	69,2	71,5	73,6	70,5	69,5	
11	69,5	69,5	69,5	69,5	69,5	
12						
13	69,5	69,5	69,5	69,5	69,5	
14	69,5	69,9	65,9	67,6	69,9	
15	68,5	59,9	75	75,9	77,6	
16	69,2	67,1	76,2	73,7	71,1	
17	69,5	69,5	69,6	69,6	69,5	
18						
19	69,5	69,5	69,5	69,5	69,5	
20	69,5	69,6	66,8	68,8	69,6	
21	68,1	67	73,5	77,8	73,6	
22	68,5	64,9	75,5	75,1	71,4	
23	69,5	69,6	70,1	69,7	69,5	
24						
25	69,5	69,5	69,5	69,5	69,5	
26	69,6	68,8	65,9	69,8	69,5	
27	63,2	75	71,1	84,4	70,3	
28	67	71,8	75,7	74,1	69,7	
29	69,5	69,6	69,7	69,5	69,5	
30						

Figura 14. Formato fichero de Excel para splines3D.

- **Mallado:** Vector de la forma $[N_1, N_2, N_3]$ con valores enteros positivos que indican el número de nodos en x , y y t usados en los gráficos de resultados. Si se deja vacío se utiliza $[100,100,20]$.
- **Tipo de gráfica:** *Pcolor* para gráfica en pseudocolores, *Contorno* para líneas de contorno y *Errores* para gráfica de superficie con los errores cometidos (Solo se usa si se ha tomado *Función* como tipo de entrada).

Si se pulsa el botón *Seleccionar Excel* (y se ha elegido *Excel* como tipo de entrada) se abre una ventana en donde es posible seleccionar el fichero de excel que contiene los datos a utilizar para los cálculos. El fichero tiene que contener los datos organizados como muestra la figura 14. Las entradas vienen dadas en bloques como en el caso de haber elegido *matriz de puntos*.

Si se pulsa *Ayuda* se muestra un documento pdf con indicaciones de cómo hay que usar la aplicación. El botón *Pulsar Botón* genera los resultados gráficos animados del spline $S(x, y, t)$ para los valores de t introducidos mediante el vector dado por los nodos del eje T .

4.4 App para la aproximación mínimo-cuadrática por splines de dimensión uno

En la figura 15 se muestra la aplicación `splineMC.mlapp`. Los parámetros de entrada son los siguientes:

- **Tipo de entrada:** Desplegable a elegir entre *Función*, *matriz de puntos* y *excel*.
- **Función:** Expresión de la función a aproximar en la variable x .

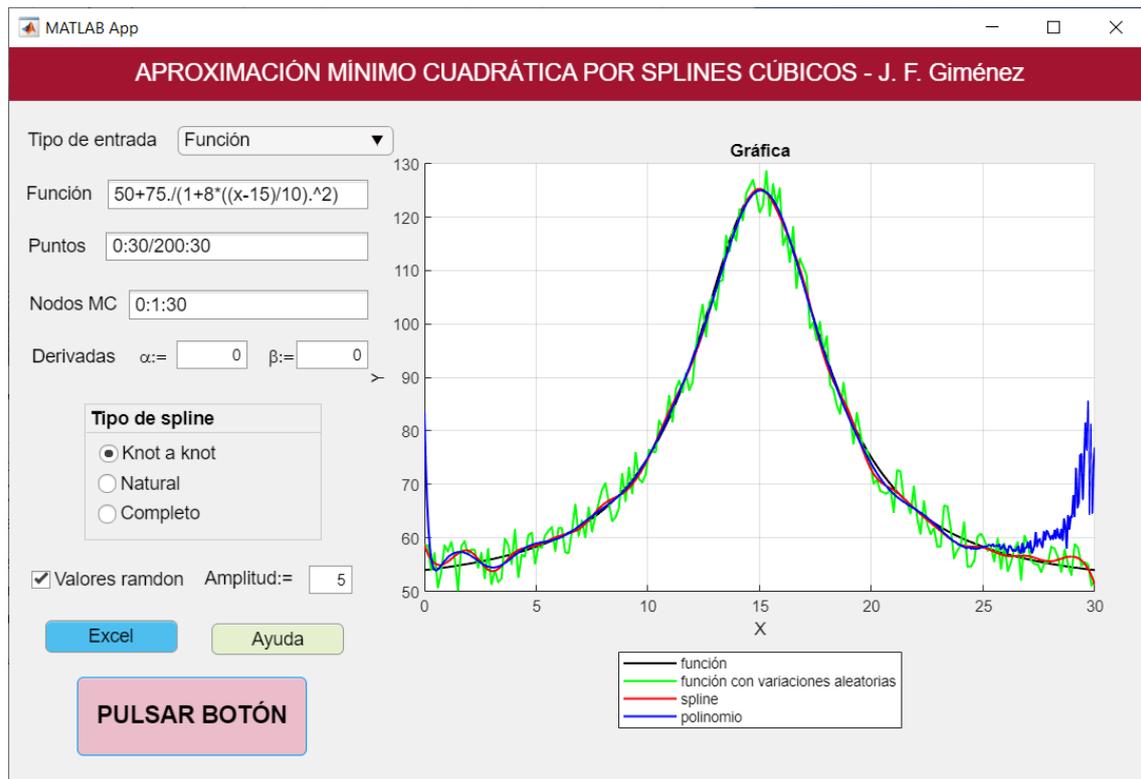


Figura 15. El laboratorio virtual `splinesMC` (ver ejemplo 5.2.1).

- **Puntos:** Si se ha tomado *Función* como tipo de entrada recoge el vector (x_i) con los nodos. Si se ha tomado *matriz de puntos* como tipo de entrada recoge a la matriz con los valores (x_i, y_i) a aproximar.
- **Nodos MC:** Vector con los nodos \tilde{x}_i usados en la técnica de mínimos cuadrados.
- **Derivadas:** Solo se usa si se ha tomado *Completo* como tipo de spline.
 α valor de la derivada en el extremo izquierda
 β valor de la derivada en el extremo derecha
- **Tipo de spline:** a elegir entre *Knot a Knot*, *Natural* y *Completo*.

- **Valores random:** si se selecciona se generan valores aleatorios de amplitud A que modifican el valor de $y_i = f(x_i)$
- **Amplitud:** A

Si se pulsa el botón Seleccionar *Excel* (y se ha elegido *Excel* como tipo de entrada) se abre una ventana en donde es posible seleccionar el fichero de excel que contiene los datos a utilizar para los cálculos.

Si se pulsa *Ayuda* se muestra un documento pdf con indicaciones de cómo hay que usar la aplicación. El botón *Pulsar Botón* genera los resultados gráficos.

4.5 App para la aproximación mínimo-cuadrática por splines de dimensión dos

La aplicación **splineBMC.mlapp** se muestra en la figura 16. Los parámetros de entrada son los siguientes:

- **Tipo de entrada:** Desplegable a elegir entre *Función*, *matriz de puntos* y *excel*.
- **Función:** Expresión del campo escalar a aproximar en las variables x e y .
- **X:** Vector que recoge los valores (x_i) de los nodos del eje X.
- **Y:** Vector que recoge los valores (y_j) de los nodos del eje Y.
- **Z:** Recoge a la matriz con los valores (z_{ij}) a aproximar solo si se ha tomado *Función* como tipo de entrada.
- **Abcisas MC:** Vector con los nodos \tilde{x}_i usados en la técnica de mínimos cuadrados.
- **Ordenadas MC:** Vector con los nodos \tilde{y}_i usados en la técnica de mínimos cuadrados.
- **Valores random:** si se selecciona se generan valores aleatorios de amplitud A que modifican el valor de $z_{ij} = f(x_i, y_j)$.
- **Amplitud:** A

Si se pulsa el botón Seleccionar *Excel* (y se ha elegido *Excel* como tipo de entrada) se abre una ventana en donde es posible seleccionar el fichero de excel que contiene los datos a utilizar para los cálculos. El fichero tiene que contener los datos organizados como muestra la figura 12.

Si se pulsa *Ayuda* se muestra un documento pdf con indicaciones de cómo hay que usar la aplicación. El botón *Pulsar Botón* genera los resultados gráficos.

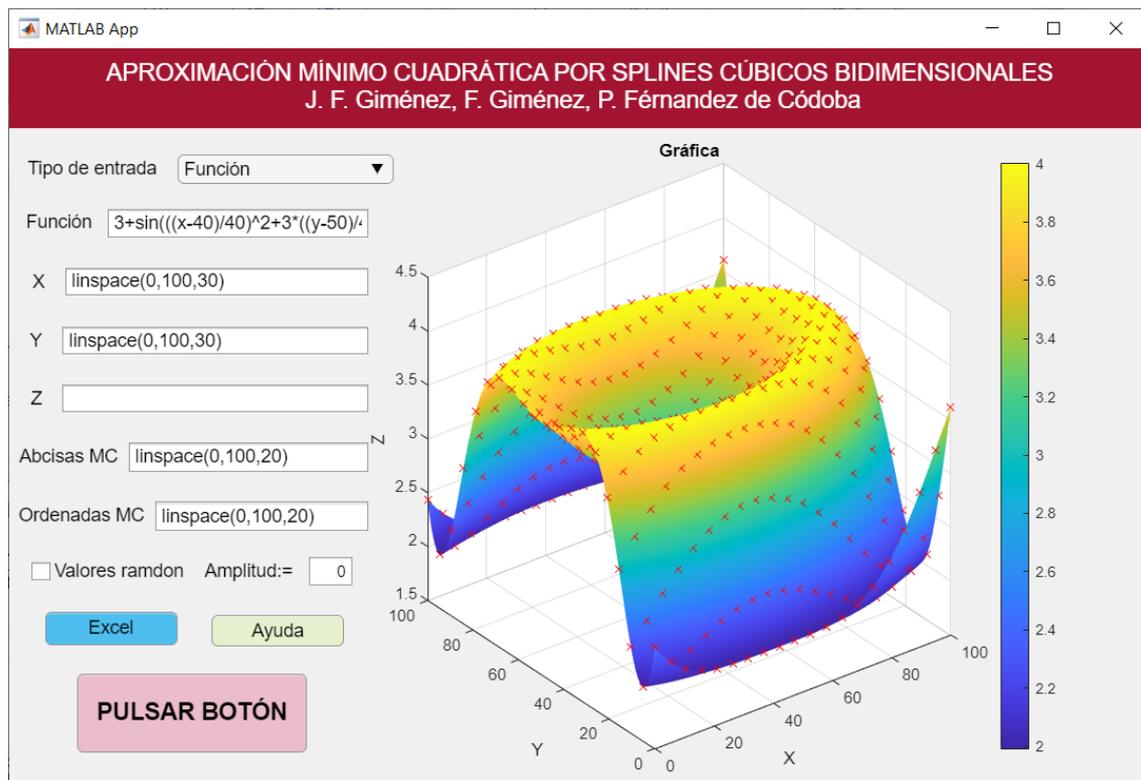


Figura 16. El laboratorio virtual splinesBMC (ver ejemplo 5.2.3).

4.6 App para la resolución aproximada de la ecuación del transporte 2D

Los parámetros de entrada de la aplicación **transporteSPLI.mlapp** (ver fig. 17) son los siguientes:

- **Tipo de entrada:** Desplegable a elegir entre *Funciones*, *Puntos* y *Excel*.
- **Condiciones:** desplegable a elegir entre *Dirichlet* y *Neumann*.
- **A:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en las variables x y t para el área $A(t, x)$. Si se ha seleccionado *Puntos* es una matriz con los valores $A(t_i, x_j)$.
- **dtA:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en las variables x y t de $\frac{\partial A}{\partial t}(t, x)$. Si se ha seleccionado *Puntos* es una matriz con los valores $\frac{\partial A}{\partial t}(t_i, x_j)$.
- **dxA:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en las variables x y t de $\frac{\partial A}{\partial x}(t, x)$. Si se ha seleccionado *Puntos* es una matriz con los valores $\frac{\partial A}{\partial x}(t_i, x_j)$.
- **D:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en las variables x y t para el coeficiente de dispersión en la dirección x , $D(t, x)$. Si se ha seleccionado *Puntos* es una matriz con los valores $D(t_i, x_j)$.

- **dxD:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en las variables x y t de $\frac{\partial D}{\partial x}(t, x)$. Si se ha seleccionado *Puntos* es una matriz con los valores $\frac{\partial D}{\partial x}(t_i, x_j)$.
- **U:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en las variables x y t para la componente de velocidad promediada en superficie $u(t, x)$. Si se ha seleccionado *Puntos* es una matriz con los valores $u(t_i, x_j)$.
- **dxU:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en las variables x y t de $\frac{\partial u}{\partial x}(t, x)$. Si se ha seleccionado *Puntos* es una matriz con los valores $\frac{\partial u}{\partial x}(t_i, x_j)$.
- **R:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en las variables x y t para el término de reacción $R(t, x)$. Si se ha seleccionado *Puntos* es una matriz con los valores $R(t_i, x_j)$.
- **C0:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en la variable x que recoge la concentración inicial $C_0(x)$. Si se ha seleccionado *Puntos* es un vector con los valores $C_0(x_j)$.
- **Cexacta:** Expresión en las variables x y t que recoge la solución exacta si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* (y es conocida).
- **α :** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en la variable t de $\alpha(t) = C(t, 0)$. Si se ha seleccionado *Puntos* es un vector con los valores $\alpha(t_i)$.
- **β :** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* y en condiciones *Dirichlet* es una expresión en la variable t de $\beta(t) = C(t, L)$. Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* y en condiciones *Neumann* es una expresión en la variable t de $\beta(t) = \frac{\partial C}{\partial x}(t, L)$.

Si se ha seleccionado *Puntos* es un vector con los valores $\beta(t_i)$.

- **t:** Vector que recoge los valores t_i .
- **x:** Vector que recoge los valores x_j .
- **Método de las diferencias finitas:** si se selecciona se aplica el método de las diferencias finitas con un mallado a seleccionar por el usuario. Solo se usa si se ha tomado *Funciones* como tipo de entrada.
- **Mallado DF:** vector de la forma $[n, m]$ que definen el mallado de diferencias finitas. n es el número de subintervalos equiespaciados para el tiempo y m es el número de subintervalos equiespaciados para el espacio.

MATLAB App

ECUACIÓN DEL TRANSPORTE
J.F. Giménez, P. Fernández de Córdoba, F. Giménez

Tipos de entrada **Funciones** Condiciones **Dirichlet** **Excel** **Ayuda**

A:= dtA:= dxA:=

D:= dxD:= U:=

dxU:= R:= C0:=

Cexacta:= α := β :=

t:= x:=

Método de las diferencias finitas Mallado DF:=

PULSAR BOTÓN

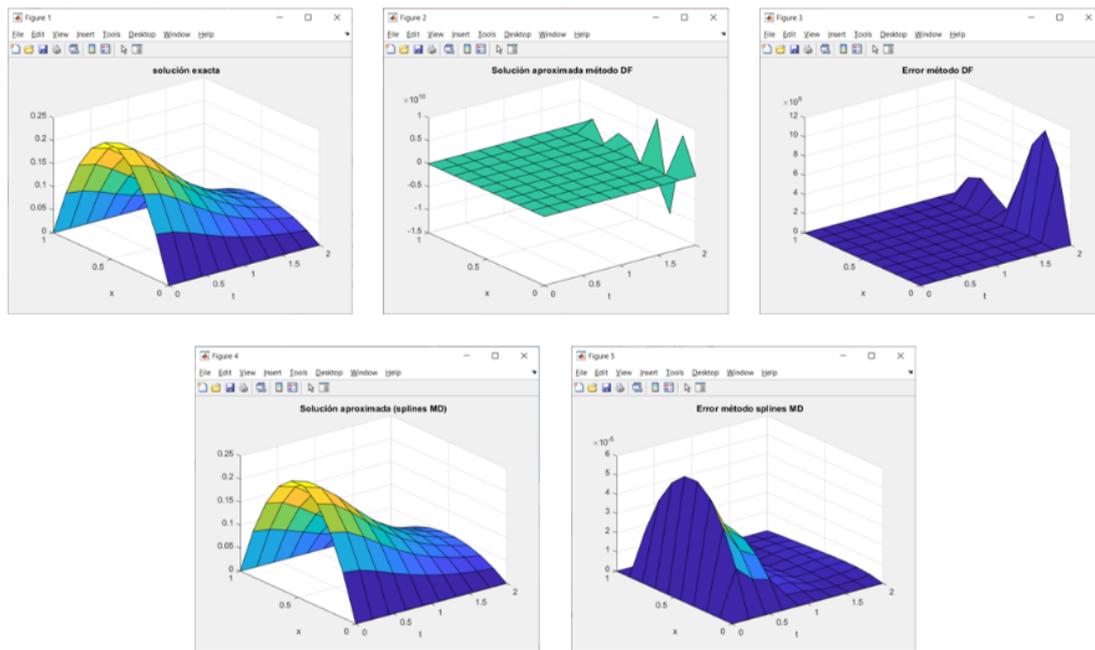


Figura 17. El laboratorio virtual transporteSPLI y los gráficos generados (ver ejemplo 5.3.2).

Si se pulsa el botón Seleccionar *Excel* (y se ha elegido *Excel* como tipo de entrada) se abre una ventana en donde es posible seleccionar el fichero de excel que contiene los datos a utilizar para los cálculos. El fichero tiene que contener los datos organizados a partir de bloques de datos en forma vertical con una fila en blanco para separar los bloques.

Si se pulsa *Ayuda* se muestra un documento pdf con indicaciones de cómo hay que usar la aplicación. El botón *Pulsar Botón* genera los resultados gráficos.

4.7 App para la resolución aproximada de PVI's de 2º orden

La app `PVI spline .mlapp` que se ha diseñado se muestra en la figura 18. Los parámetros de entrada son los siguientes:

- **Tipo de entrada:** Desplegable a elegir entre *Funciones*, *Vector de puntos* y *Excel*.
- **Condiciones:** desplegable a elegir entre *Dirichlet* y *Neumann*.
- **a:** Extremo izquierda del intervalo.
- **α :** Si se ha elegido la condición de *Dirichlet* recoge el valor de $y(a)$ y si se ha elegido *Neumann* recoge el valor de $y'(a)$.
- **b:** Extremo derecha del intervalo
- **β :** Si se ha elegido la condición de *Dirichlet* recoge el valor de $y(b)$ y si se ha elegido *Neumann* recoge el valor de $y'(b)$.
- **A:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en la variable x que recoge $A(x)$. La multiplicación, división y exponenciación hay que escribirlas mediante `.*`, `./` y `.^` respectivamente. Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Vector de puntos* es un vector que recoge los valores $A(x_i)$.
- **B:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en la variable x que recoge $B(x)$. La multiplicación, división y exponenciación hay que escribirlas mediante `.*`, `./` y `.^` respectivamente. Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Vector de puntos* es un vector que recoge los valores $B(x_i)$.
- **C:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en la variable x que recoge $C(x)$. La multiplicación, división y exponenciación hay que escribirlas mediante `.*`, `./` y `.^` respectivamente. Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Vector de puntos* es un vector que recoge los valores $C(x_i)$.
- **D:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en la variable x que recoge $D(x)$. La multiplicación, división y exponenciación hay que escribirlas mediante `.*`, `./` y `.^` respectivamente. Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Vector de puntos* es un vector que recoge los valores $D(x_i)$.
- **x:** Vector con los valores x_i (nodos que definen el spline).
- **Solución exacta:** Si en tipo de entrada se ha seleccionado *Funciones* es una expresión en la variable x que recoge la solución exacta si ésta es conocida. La multiplicación, división y exponenciación hay que escribirlas mediante `.*`, `./` y `.^` respectivamente.

Si se pulsa el botón *Seleccionar Excel* (y se ha elegido *Excel* como tipo de entrada) se abre una ventana en donde es posible seleccionar el fichero de excel que contiene los datos a utilizar para los cálculos. El fichero tiene que contener los datos organizados como muestra la figura 19 (bloques de datos) con una fila en blanco para separar los bloques.

Si se pulsa *Ayuda* se muestra un documento pdf con indicaciones de cómo hay que usar la aplicación. El botón *Pulsar Botón* genera los resultados gráficos. En todos los casos se genera la gráfica de la solución aproximada por el método de los splines y mínimos cuadrados. Si como tipo de entrada se toma *Funciones* además se generan dos gráficas: una con la solución aproximada por el método de las diferencias finitas obtenido a partir de puntos equiespaciados de $[a, b]$ (tantos como los dados por el vector \mathbf{x}) y otra las dos aproximaciones a la vez (splines y DF). Si se conoce la solución exacta además se genera la gráfica con todas a la vez y la de los errores correspondientes.

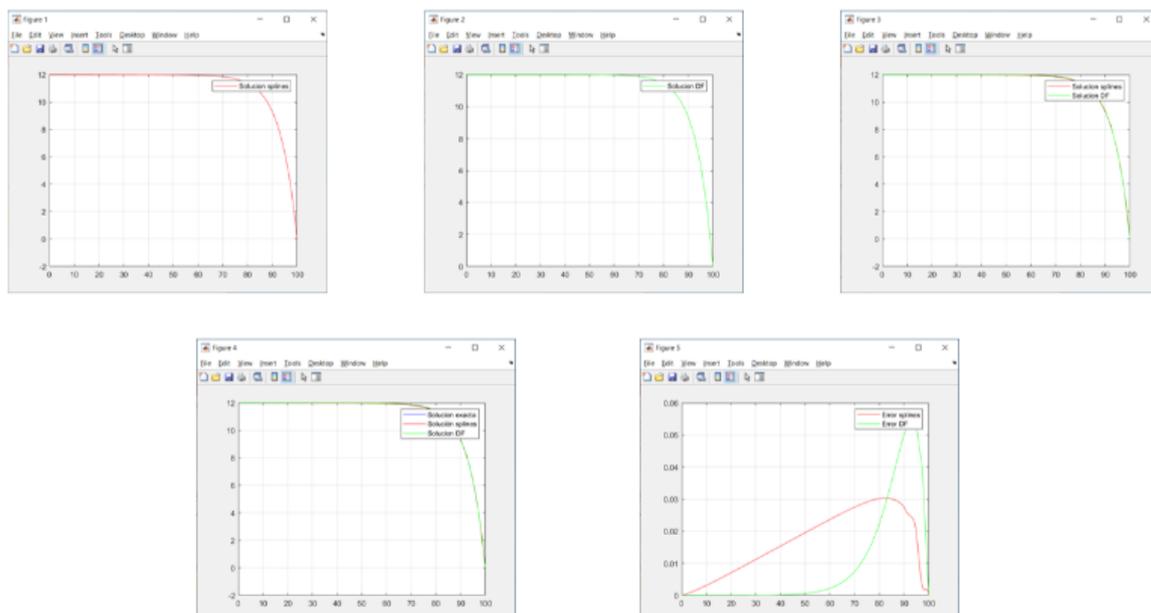
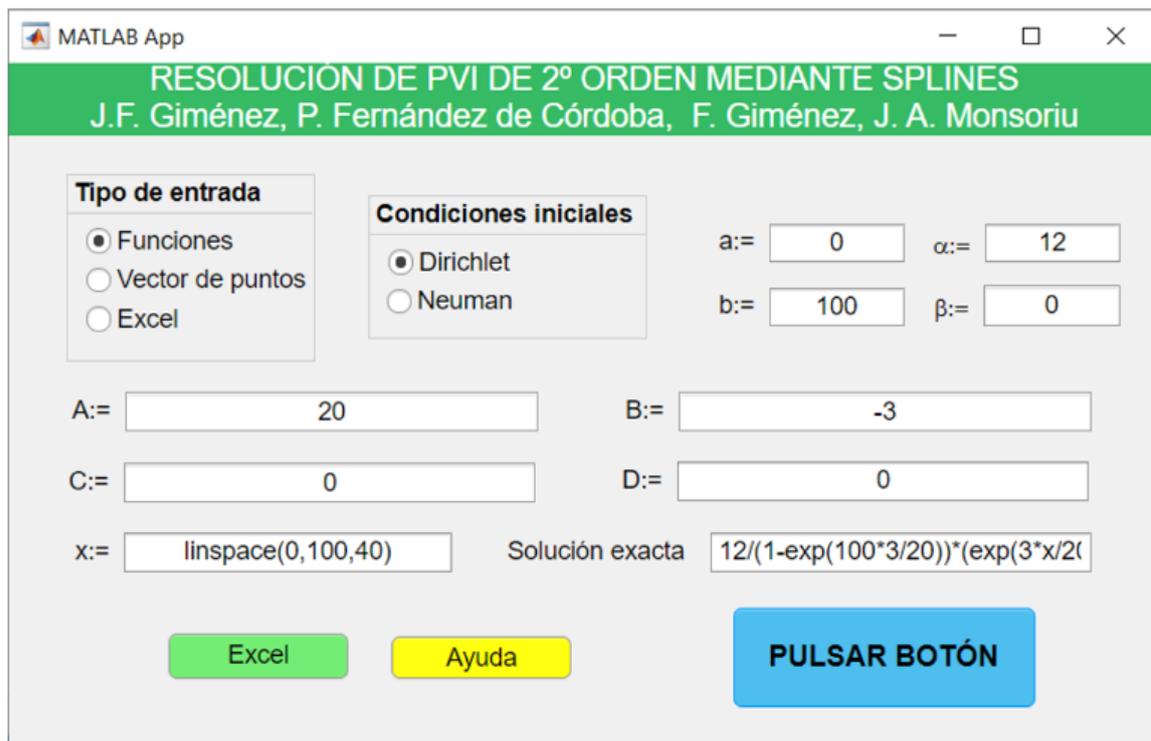


Figura 18. El laboratorio virtual PVI spline y los gráficos generados (ejemplo 5.3.7).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	0,00	0,33	0,67	1,00	1,33	1,67	2,00	2,33	2,67	3,00
2	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
3	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
4	-1,00	-0,56	0,78	3,00	6,11	10,11	15,00	20,78	27,44	35,00
5	0,00	0,05	-0,15	-0,62	-0,86	-0,31	0,61	0,53	-0,44	-0,21
6										
7										
8										
9										
10										
11										
12										

Figura 19. Formato fichero de Excel para PVI spline.

5. ANÁLISIS Y VALIDACIÓN DE RESULTADOS

5.1 Aplicaciones de los splines multidimensionales

5.1.1 Ejemplo 1: índice de calidad del aire

El índice de calidad del aire (ICA) es un indicador del nivel de contaminación que refleja las cantidades (concentraciones) de los contaminantes presentes en el aire. Se basa en mediciones realizadas en estaciones ubicadas en muchas ciudades y pueblos. En 2017 la Agencia Europea del Medio Ambiente puso en marcha un nuevo índice de calidad del aire que tiene en cuenta los cinco contaminantes que son más perjudiciales para la salud de las personas y del medio ambiente:

- Partículas en suspensión (PM_{2,5} y PM₁₀)
- Ozono troposférico (O₃)
- Dióxido de nitrógeno (NO₂)
- Dióxido de azufre (SO₂)

La tabla 1 muestra el rango de valores de cada uno de los contaminantes para cada uno de los niveles. El ICA refleja el peor nivel de cualquiera de los cinco contaminantes.

Tabla 1. Cálculo del índice de calidad del aire

CALIDAD DEL AIRE	Índice de Calidad del Aire ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)				
Contaminantes	Muy bueno	Bueno	Regular	Malo	Muy malo
Partículas PM _{2,5}	0-10	11-20	21-25	26-50	51-800
Partículas PM ₁₀	0-20	21-35	36-50	51-100	101-1200
Dióxido de Nitrógeno (NO ₂)	0-40	41-100	101-200	201-400	401-1000
Ozono (O ₃)	0-80	81-120	121-180	181-240	241-600
Dióxido de Azufre (SO ₂)	0-100	101-200	201-350	351-500	501-1250

En la página web (MITECO B, 2016) del Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico puede consultarse un mapa interactivo (figura 20) que muestra en tiempo real el ICA que marcan las estaciones de medición de la red nacional de vigilancia. También es interesante la web de ayuntamiento de Madrid (MAMBIENTE, 2021).

Tabla 2. Concentraciones de los contaminantes

Hora	Partículas PM _{2,5}	Partículas PM ₁₀	NO ₂	O ₃	S02
0	28	24	102	96	220
0,5	27	28	101	94	212
1	23	31	110	93	186
1,5	24	31	106	90	145

2	21	30	98	87	106
2,5	19	29	96	82	98
3	16	28	86	80	94
3,5	14	28	86	81	92
4	14	23	85	78	93
4,5	13	21	76	76	105
5	10	20	83	74	145
5,5	16	23	90	73	187
6	22	27	101	81	198
6,5	26	32	116	84	206
7	33	36	139	87	245
7,5	38	39	156	86	266
8	37	42	193	91	300
8,5	37	46	202	93	353
9	36	46	212	100	358
9,5	37	50	206	106	360
10	35	56	192	115	352
10,5	34	54	185	122	341
11	29	50	167	128	322
11,5	25	46	146	132	306
12	26	41	127	133	308
12,5	28	38	120	136	296
13	24	37	118	145	300
13,5	24	35	116	156	301
14	23	35	117	160	287
14,5	24	33	120	163	276
15	21	33	120	161	277
15,5	19	34	111	161	265
16	16	31	107	157	260
16,5	14	30	102	153	261
17	12	30	96	150	197
17,5	12	29	94	150	190
18	13	26	93	147	200
18,5	17	27	99	145	212
19	22	28	96	145	245
19,5	25	30	102	139	267
20	28	31	112	136	288
20,5	31	35	120	138	295
21	33	36	124	129	301
21,5	30	36	121	120	288
22	32	37	117	114	255
22,5	29	34	109	106	243
23	29	35	104	99	239
23,5	28	33	106	98	233
24	27	30	104	98	228

La tabla 2 recoge las mediciones cada media hora de las concentraciones de cada uno de los contaminantes en un intervalo de tiempo de 24 horas de una estación de medición. A partir de los datos se utilizan splines knot a knot para generar varias gráficas. La figura 21 muestra la vez las concentraciones de todos los contaminantes. Las figuras 22, 23 y 24 recogen la información gráfica individual en cada caso junto con los segmentos que permiten establecer el nivel de calidad en función del tiempo en horas.

De los gráficos mostrados puede deducirse la variación del índice de la calidad del aire a lo largo del día (ver tabla 3 y la figura 25).

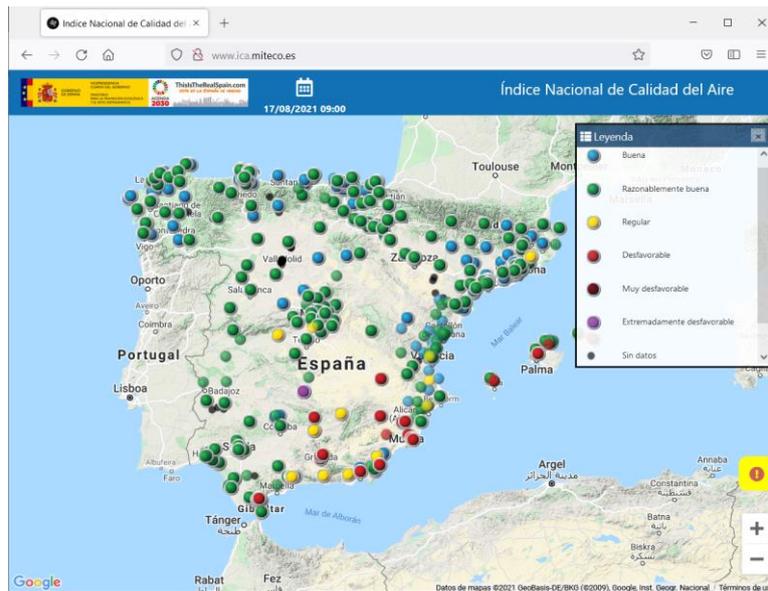


Figura 20. Página web mapa ICA

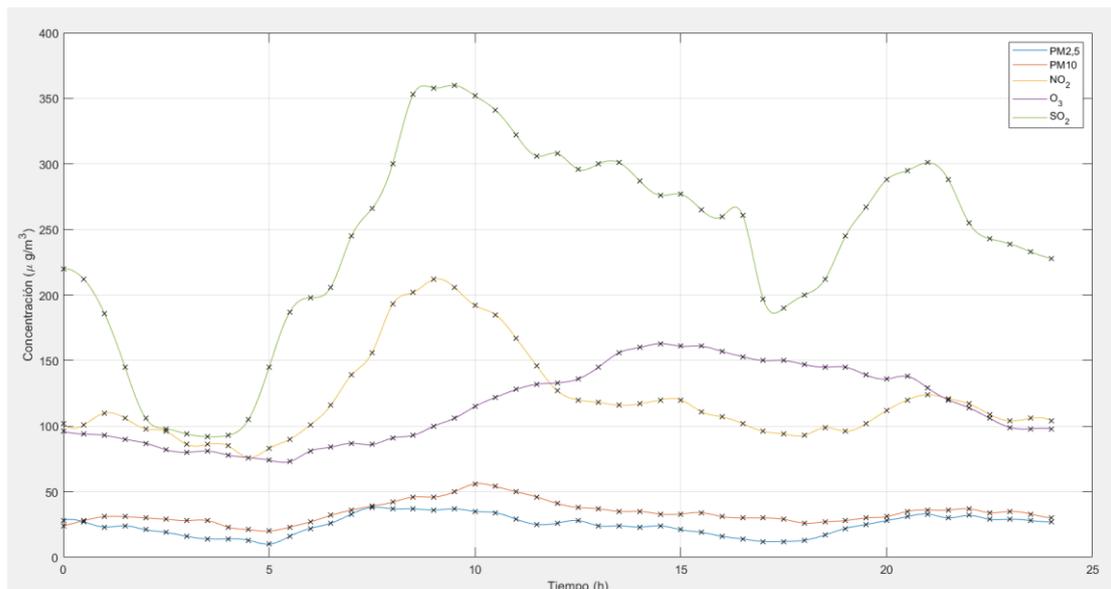


Figura 21. Gráfica de las concentraciones de los contaminantes

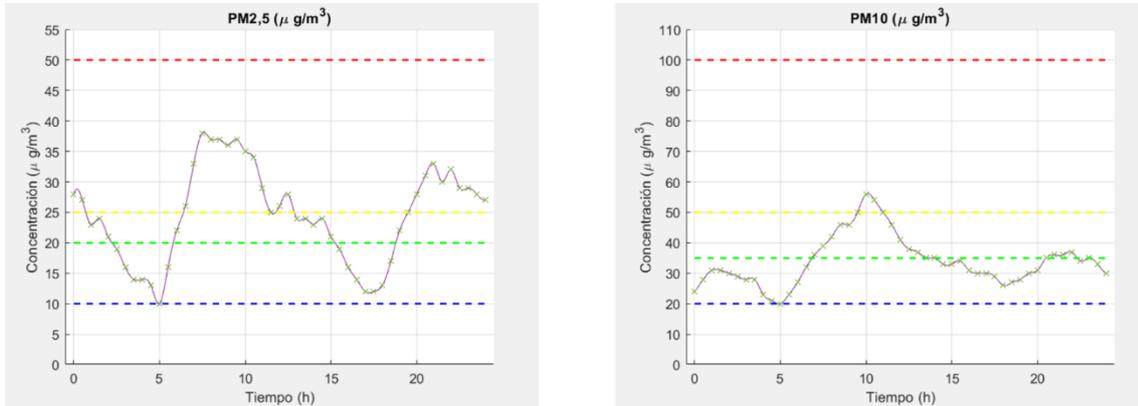


Figura 22. Gráficas de las concentraciones de PM2.5 y PM10.

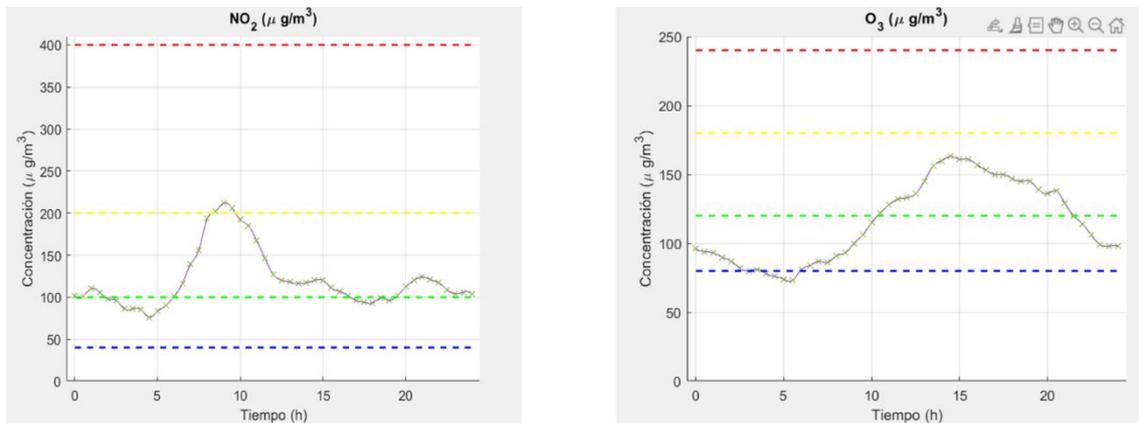


Figura 23. Gráficas de las concentraciones de NO₂ y O₃.

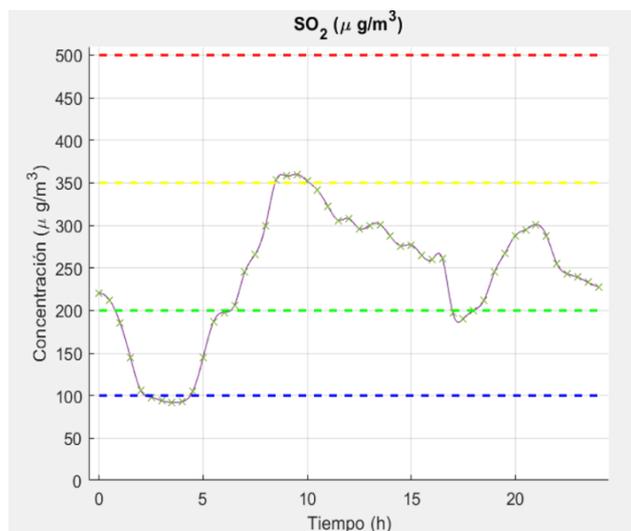


Figura 24. Gráficas de las concentraciones de SO₂

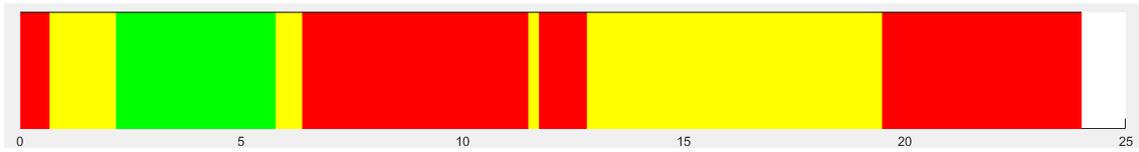


Figura 25. Índice de calidad del aire por tiempo (colores: verde bueno, amarillo regular, rojo malo)

Tabla 3. Índice de calidad del aire por tiempo.

Rango de tiempo (h)	Índice calidad
[0,0.66]	malo
[0.66,2.17]	regular
[2.17 5.77]	bueno
[5.77,6.38]	regular
[6.38,11.49]	malo
[11.49,11.73]	regular
[11.73,12.81]	malo
[12.81,19.49]	regular
[19.49,24.00]	malo

5.1.2 Ejemplo 2: vertido de alquitrán

Los vertidos de hidrocarburos suponen un importante problema de contaminación cuando se producen. A nivel exclusivamente de validación del método de los splines bidimensionales que se ha propuesto en el apartado 3.2 del capítulo 3 vamos a considerar el caso de un vertido de alquitrán del que se conoce que la concentración en kg/m^2 en cada uno de los puntos viene dada por la función

$$C(x,y) = \frac{19y + 270}{900} \operatorname{sen}\left(\frac{7x + 1560}{240}\right) - \frac{7x + 1560}{240} \cos\left(\frac{19y + 270}{900}\right) - 9 \quad (5.1)$$

donde (x,y) son puntos del recinto mostrado en la figura 27.



Figura 26. Operario trabajando en un vertido de alquitrán

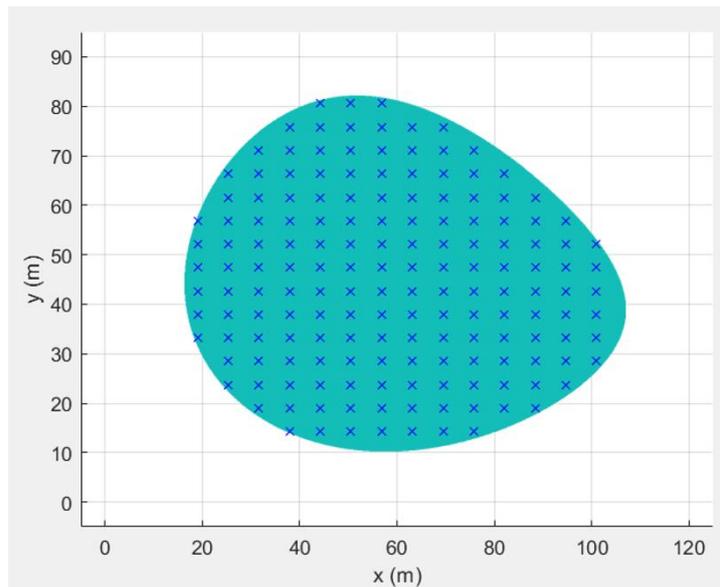


Figura 27. Recinto del vertido y nodos utilizados.

Se aplica el método de los splines bidimensionales usando el mallado mostrado en la figura 27 con nodos equidistantes 5 metros tanto para el eje x como el eje y . Se toman los valores proporcionados por la función (5.1) dentro del recinto (ver figura 28) y valores iguales a 0 fuera. Las figuras 29 y 30 muestran la gráfica en seudocolores de la solución exacta y de la aproximada respectivamente. Las figuras 31 y 32 presentan las gráficas de superficie y de seudocolores del error cometido.

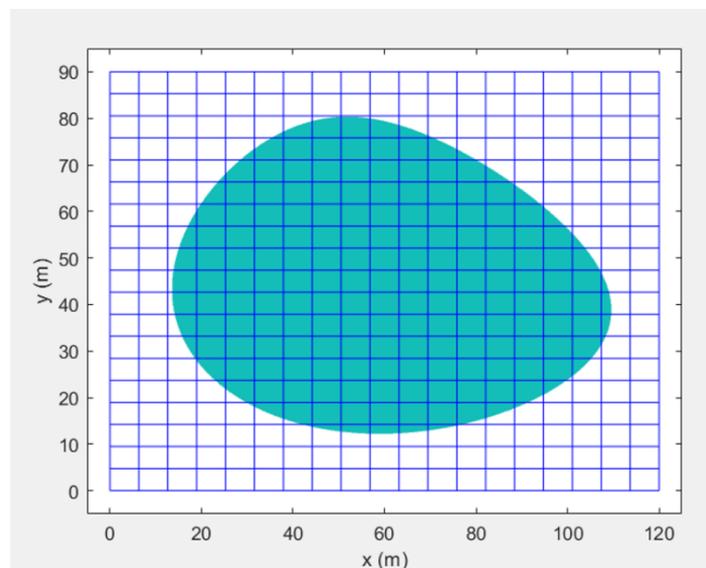


Figura 28. Mallado utilizado para la aproximación por splines bidimensionales.

A partir de las gráficas es inmediato deducir que la aproximación por splines bidimensionales proporciona muy buenos resultados.

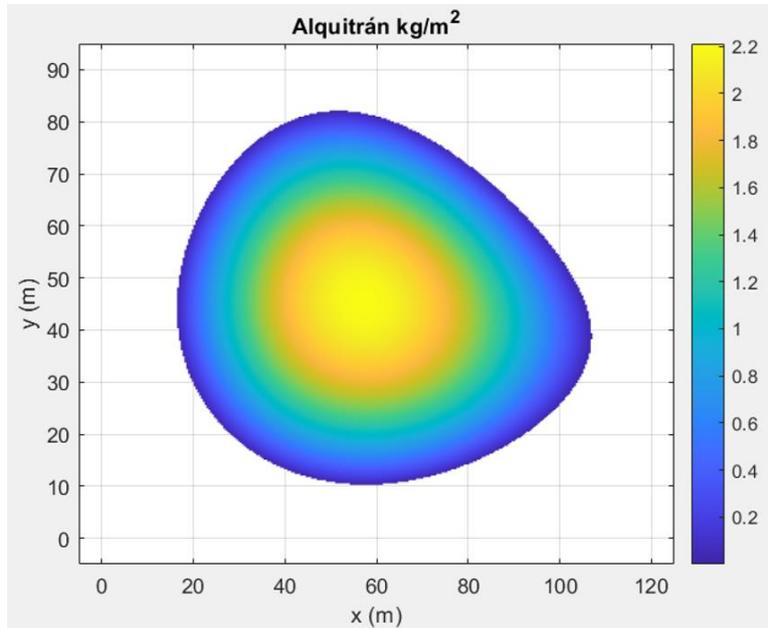


Figura 29. Concentración de alquitrán exacta.

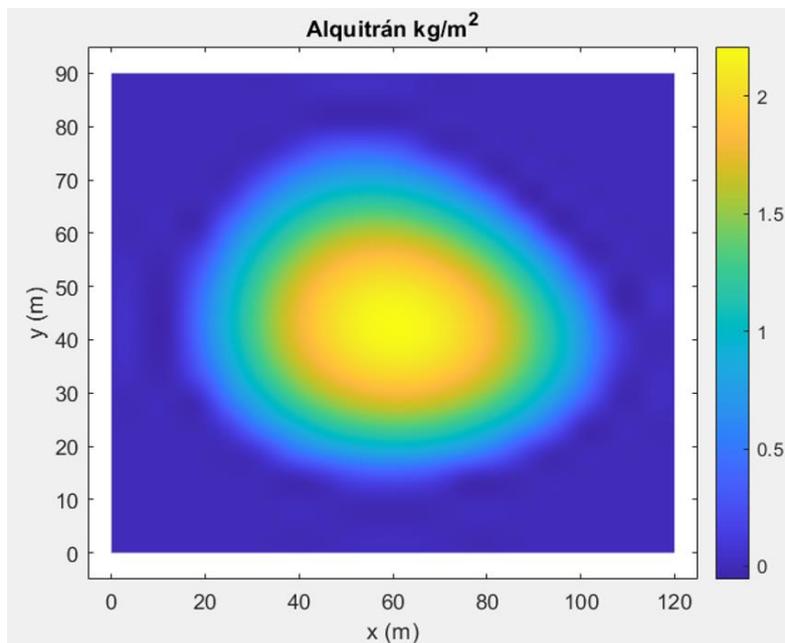


Figura 30. Concentración de alquitrán aproximada (splines BD)

Se puede estimar la cantidad de alquitrán que hay que recoger para proceder a la limpieza a partir los valores calculados del spline bidimensional usando la integración de Simpson doble (ver la función `int_simpson2.m` en el apéndice). Trabajando con un mallado 300×300 se obtiene la aproximación de 5274.48 kg. En este caso también se puede calcular el valor real que resulta ser de 5273.33 kg. El error cometido es de un 0.022%.

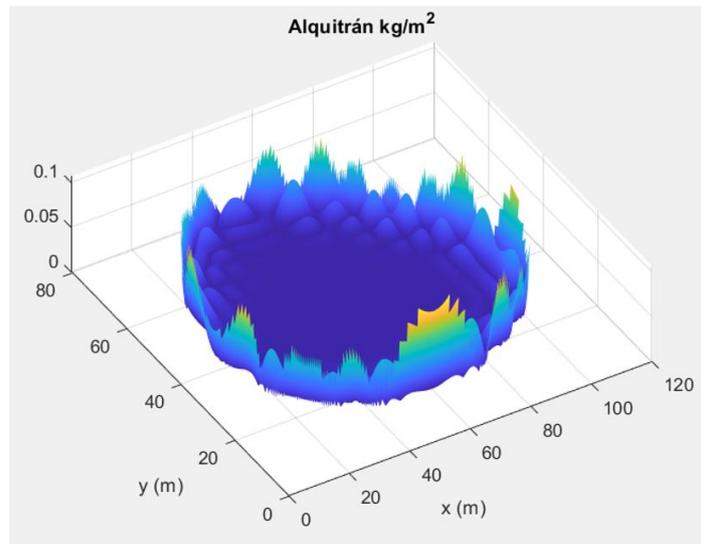


Figura 31. Error concentración de alquitrán (superficie).

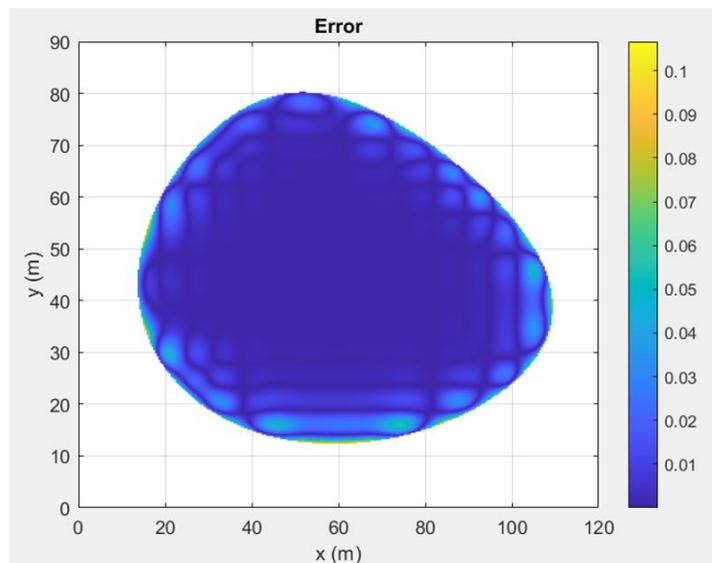


Figura 32. Error concentración de alquitrán en kg/m² (seudocolores).

5.1.3 Ejemplo 3: contaminación lumínica

La contaminación lumínica puede definirse como la alteración de la oscuridad natural de la noche, provocada por las emisiones de luz provocada por fuentes artificiales de manera desaprovechada o inadecuada. Se sabe que genera impactos en la salud y en la vida de los seres vivos. Se manifiesta por un aumento del brillo del cielo nocturno, por reflexión y difusión de la luz en los gases y en las partículas del aire urbano lo que conlleva una disminución de la visibilidad de las estrellas y demás objetos celestes.

Existe una gran cantidad de métodos para medirla: SQM (Sky Quality Meter), cámaras fotográficas CCD o CMOS, espectrofotómetro, etc. Sobre este tipo de contaminación puede consultarse la referencia (Navas, 2015).

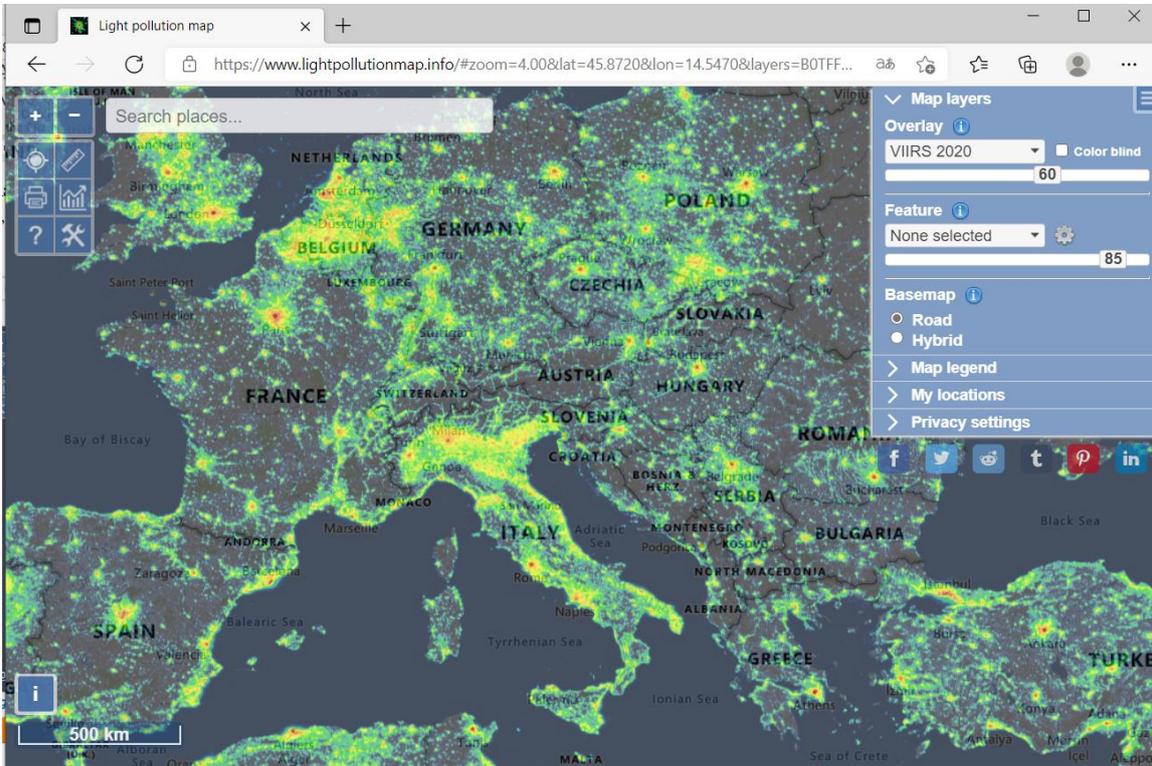


Figura 33. Página web www.lightpollutionmap.info (mapa contaminación lumínica).

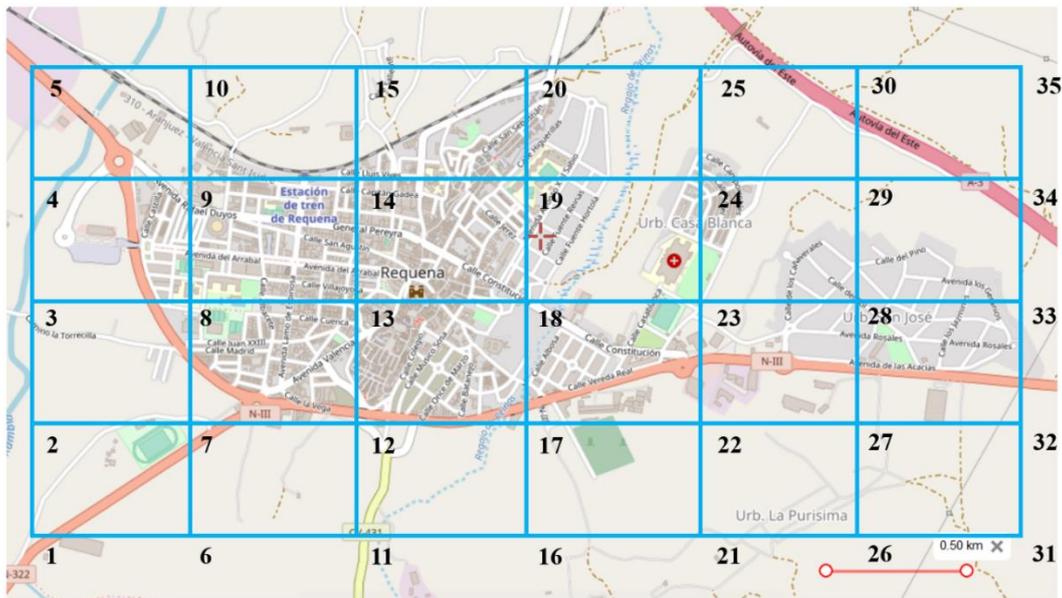


Figura 34. Mallado utilizado en el ejemplo 3.

En la página web LIGHTPOLLUTIONMAP (2021) puede encontrarse un mapa interactivo global que muestra de manera gráfica la contaminación lumínica en el planeta Tierra, con posibilidades de realizar zooms detallados y múltiples opciones de visualización (figura 33).

La tabla 4 muestra los datos de radiancia (medidos en $10^{-9}W/cm^2$) de una población correspondientes a 7×5 puntos mostrados en el mallado de la figura 34. Utilizando estos valores con el método de los splines bidimensionales se obtiene la gráfica de contaminación lumínica que puede observarse en la figura 35.

Tabla 4. Medición de la radiancia ($10^{-9} W/cm^2$) en los puntos del mallado.

Punto	Radiancia	Punto	Radiancia	Punto	Radiancia	Punto	Radiancia
1	4,43	11	10,21	21	27,79	31	13,36
2	4,23	12	49,48	22	32,1	32	11,38
3	10,72	13	74,9	23	49,23	33	15,49
4	9,94	14	42,01	24	26,48	34	4,41
5	14,67	15	7,94	25	6,19	35	1,09
6	7,17	16	12,1	26	6,05		
7	37,5	17	38,83	27	24,76		
8	60,29	18	68,04	28	39,75		
9	32,12	19	43,77	29	26,48		
10	7,64	20	7,95	30	16,67		

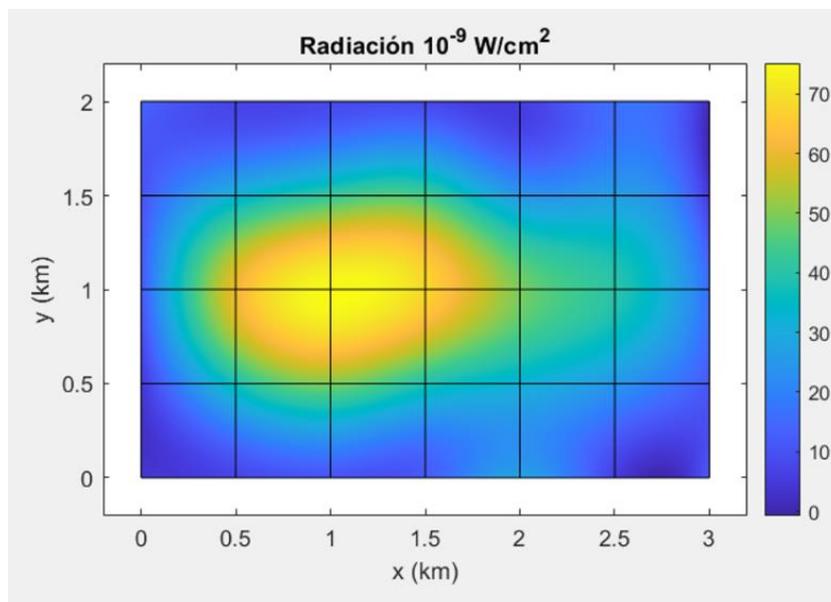


Figura 35. Mapa radiancia de Requena

5.1.4 Ejemplo 4: contaminación bacteriológica

La contaminación bacteriológica del agua es la debida a la presencia de microorganismos bacterianos potencialmente patógenos. La calidad del agua depende en buena medida de que este tipo de contaminación presente valores aceptables que no supongan ningún peligro para los seres vivos. Para medirla se puede usar un indicador de la cantidad de microorganismos vivos en un líquido llamado *ufc* (unidades formadoras de colonia), termino usado en microbiología (Edzwald, 2011; Merkel Y Planer-Friedrich, 2008). Es necesario observar en el laboratorio la muestra por un período de tiempo para calcularlo.

Vamos a considerar, a efectos de validación de la aproximación por splines tridimensionales, el caso de un estanque de forma cuadrada de 100×100 metros y escasa profundidad en donde los valores de $ufc/100 \text{ cm}^3$ vienen dados por la función

$$C(x, y, t) = 15e^{2+\cos[0.012t((x-0.5)^2+(1+0.001t)(y-0.5)^2)]}$$

donde $(x, y) \in [0,1] \times [0,1]$ es la posición la posición en *hm* y $t \in [0,1000]$ es el tiempo en horas.

Se han tomado muestras superficiales a partir de un mallado de 100 puntos equidistantes tanto para el eje *x* como el *y*. Para el tiempo se ha tomado subintervalos de longitud 50. La figura 37 muestra las gráficas en seudocolores correspondientes a la concentración en los valores de $t = 500, 525, 550, 575, 600, 625, 650, 675$ y 700. La gráfica de líneas de contorno correspondiente a $t = 772$ puede verse en la figura 36.

Para estudiar los errores cometidos consideraremos el error relativo en % que se define mediante la expresión

$$\varepsilon_r(x, y, t) = \frac{|C(x, y, t) - S(x, y, t)|}{|C(x, y, t)|} \times 100$$

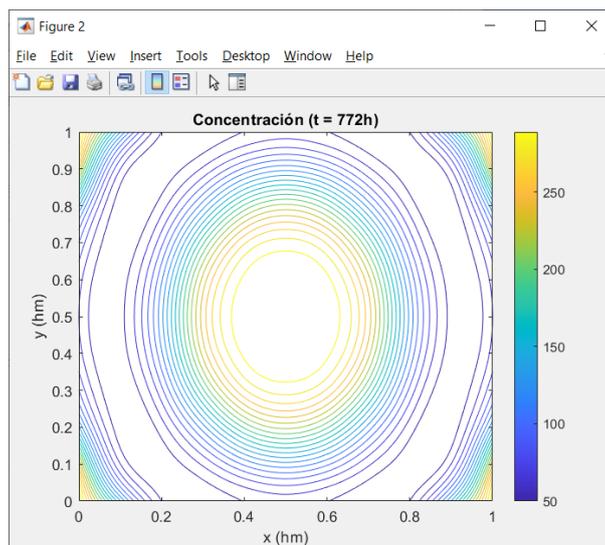


Figura 36. Gráfica de líneas de contorno de la concentración ($ufc/100 \text{ cm}^3$) correspondiente a $t = 772$.

siendo $S(x, y, t)$ la aproximación dada por el spline multidimensional. La figura 38 muestra la gráfica del error relativo medio en función del tiempo dado por

$$\tilde{\varepsilon}_r(t) = \frac{\int_0^1 \int_0^1 \varepsilon_r(x, y, t) dx dy}{\int_0^1 \int_0^1 dx dy} = \int_0^1 \int_0^1 \varepsilon_r(x, y, t) dx dy$$

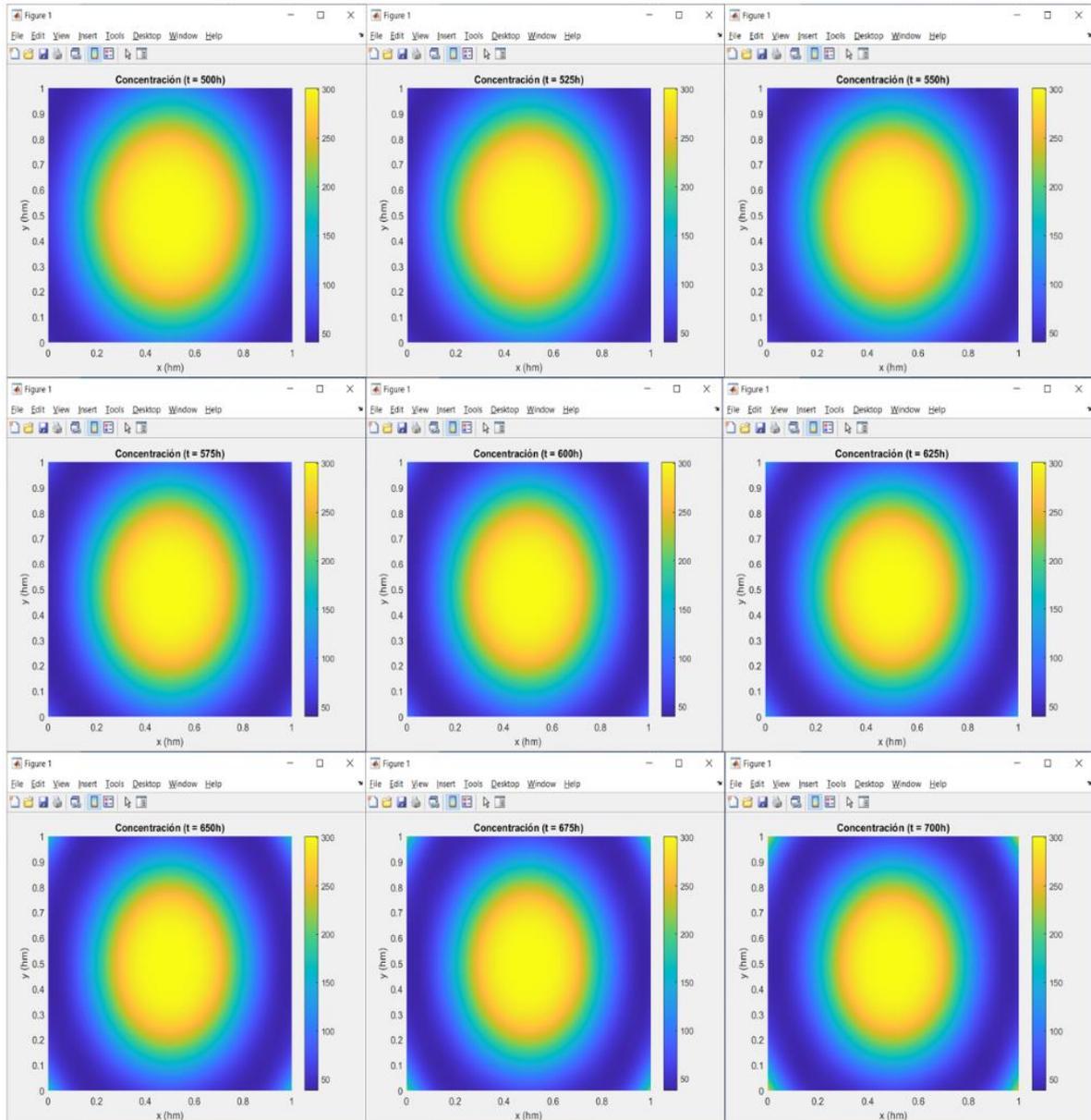


Figura 37. Concentración bacteriológica ($ufc/100\text{ cm}^3$) $t = 500, 525, 550, \dots, 700$.

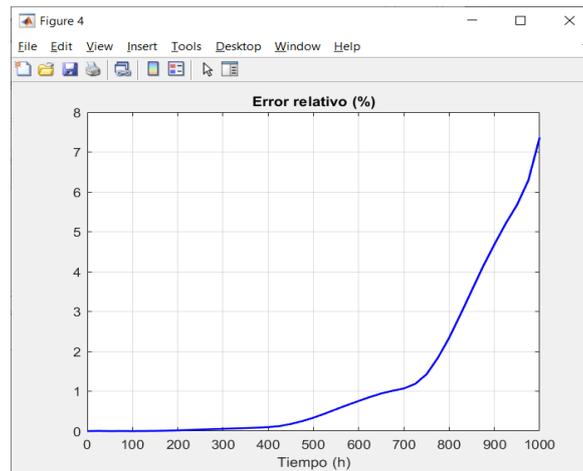


Figura 38. Gráfica del error relativo medio.

5.1.5 Ejemplo 5: congestión del tráfico, viento y contaminación

Sin lugar a duda el tráfico de vehículos supone uno de los principales problemas en relación con la contaminación (figura 39). Este problema se agrava por el efecto de la congestión en el flujo vehicular en horas punta o debido a accidentes. Existe una gran variedad de indicadores empleados para medir la congestión. Sobre el tema puede consultarse la referencia (Arya, 1999). Uno de los más utilizados es el llamado *Índice de Congestión* (CI, *Congestion Index*) que se calcula mediante la ratio entre el tiempo empleado y el tiempo que se emplearía en flujo libre en hacer el recorrido correspondiente.



Figura 39. Tráfico congestionado en la calle Játiva de Valencia.

En este apartado se parte del siguiente supuesto: se desea estudiar la relación entre el CI, la velocidad del viento y los valores medidos de monóxido de carbono a partir de los datos mostrados en la tabla 5 (ficticios) obtenidos en una estación de medición.

Tabla 5. Mediciones de la concentración de CO en $\mu\text{g}/\text{m}^3$

		Índice de congestión CI										
		1	1,2	1,3	1,6	1,8	2	2,4	2,7	3	3,5	4
Velocidad del viento (m/s)	0	14	16	18,4	21	23,4	26	28,7	30	32,5	34	36,3
	2	13	15,5	17,5	20,1	22	24,2	27	28,6	30,5	33	34
	4	12,4	15	16,8	19	20,7	22	24	27,2	29	30,2	33
	6	11,7	14,5	16	17,9	20	21	21,9	24,5	26	27	29,4
	8	11,3	13,6	15	17	18,4	19,6	21	23,5	24,6	25,5	27
	10	11	12,6	13,5	14,9	16	17	18,5	20	21	22,8	24,5
	12	10,2	11	11,8	12,4	14,3	15,5	16	17,7	18,8	21	22,3
	14	9,8	10,3	11,1	11,6	12,9	13,5	14,3	15,4	16,7	18	19,5
	16	9,3	9,7	10,3	11	11,9	12,4	13	13,6	14,3	15	16
18	9	9,5	10	10,4	10,9	11,5	11,9	12,6	13	13,6	14,5	

A partir de estos valores se aplica el método de los splines bidimensionales para obtener las gráficas en pseudocolores (figura 40) y la de líneas de contorno (figura 41) de la concentración de monóxido de carbono en función de la velocidad del viento y del índice de congestión. La figura 42 muestra la relación entre el CI y la concentración de CO para una velocidad del viento de 11 m/s. La figura 43 muestra la relación entre la velocidad del viento y la concentración de CO para un valor de CI de 2.5.

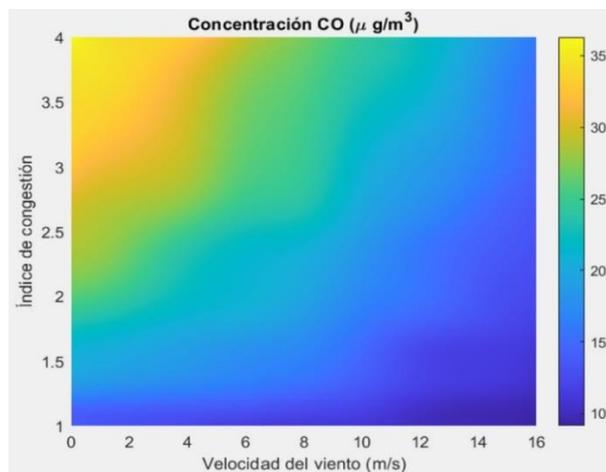


Figura 40. Gráfica de pseudocolores de la concentración de CO.

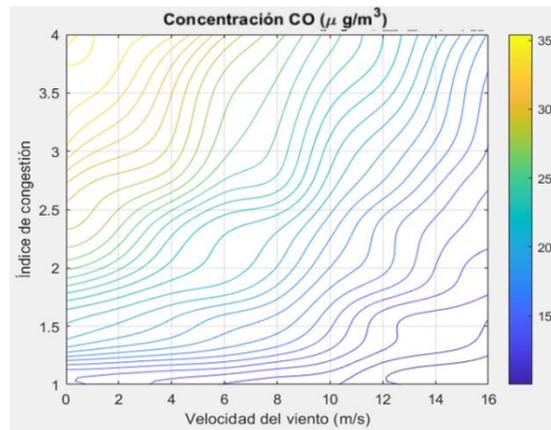


Figura 41. Gráfica de líneas de contorno de la concentración de CO.

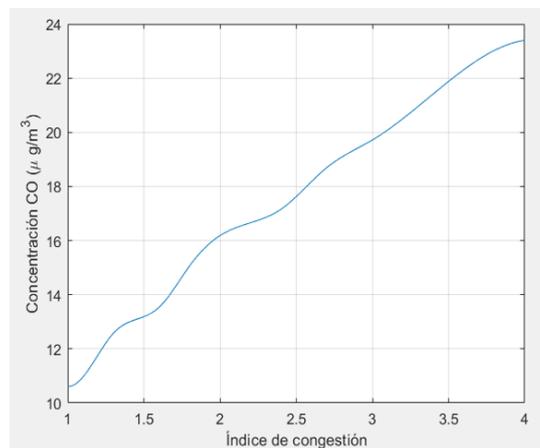


Figura 42. Gráfica de CI vs concentración de CO para la velocidad del viento de 11 m/s.

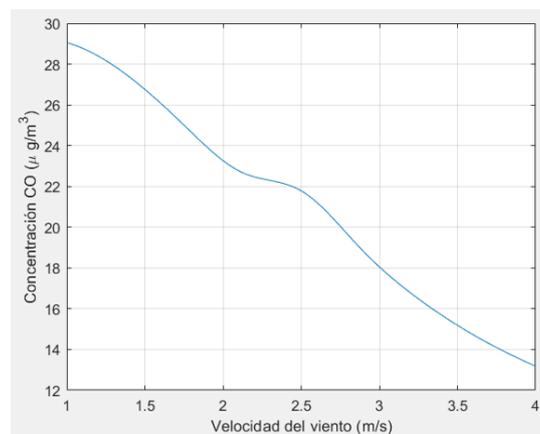


Figura 43. Gráfica de velocidad del viento vs concentración de CO para un valor de CI de 2.5.

5.1.6 Ejemplo 6: contaminación sonora

Según el Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico (MITECO A, 2021) la contaminación sonora consiste en “la presencia en el ambiente de ruidos o vibraciones, cualquiera que sea el emisor acústico que los origine, que impliquen molestia, riesgo o daño para las personas, para el desarrollo de sus actividades o para los bienes de cualquier naturaleza, o que causen efectos significativos sobre el medio ambiente”. Por encima de cierto nivel este tipo de contaminación resulta pernicioso para el descanso y la comunicación. Sobre el tema puede consultarse la referencia (Paya y Gutiérrez, 2001).



Figura 44. Contaminación sonora.

Los mapas de ruido consisten en la representación gráfica de los ruidos correspondientes a una zona concreta. Se considera el caso de una zona rectangular de 600 por 500 metros en donde se han instalado sensores formando el mallado de la figura 45 con el objetivo de evaluar el ruido producido a lo largo de 4 horas. La información recogida cada hora se muestra en la tabla 6.

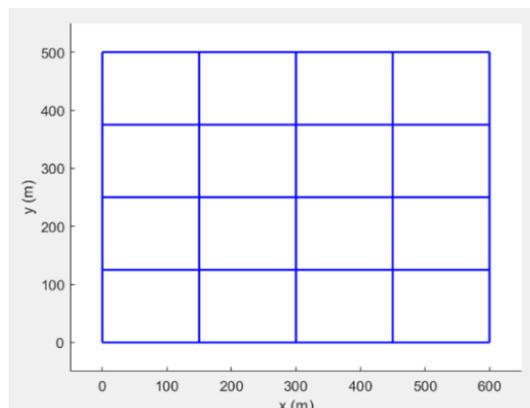


Figura 45. Mallado usado en las mediciones.

Tabla 6. Valores en dBA medidos en $t=0,60,120, 180$ y 240 minutos.

Tiempo 0 (min)				
69,5	69,4	68,9	69,4	69,5
69	71,8	66,1	73	70,9
66,6	60,4	70,2	79,8	72,5
69,4	69,9	72,4	70,3	69,6
69,5	69,5	69,5	69,5	69,5
Tiempo 60 (min)				
69,5	69,4	69,2	69,5	69,5
69,1	71,4	63,6	72,6	69,7
61,4	67,4	69,4	84,9	70,5
69,2	71,5	73,6	70,5	69,5
69,5	69,5	69,5	69,5	69,5
Tiempo 120 (min)				
69,5	69,5	69,5	69,5	69,5
69,5	69,9	65,9	67,6	69,9
68,5	59,9	75	75,9	77,6
69,2	67,1	76,2	73,7	71,1
69,5	69,5	69,6	69,6	69,5
Tiempo 180 (min)				
69,5	69,5	69,5	69,5	69,5
69,5	69,6	66,8	68,8	69,6
68,1	67	73,5	77,8	73,6
68,5	64,9	75,5	75,1	71,4
69,5	69,6	70,1	69,7	69,5
Tiempo 240 (min)				
69,5	69,5	69,5	69,5	69,5
69,6	68,8	65,9	69,8	69,5
63,2	75	71,1	84,4	70,3
67	71,8	75,7	74,1	69,7
69,5	69,6	69,7	69,5	69,5

Si se utiliza el método de los splines tridimensionales para el tratamiento de los datos se obtienen los mapas de ruidos secuenciados desde $t = 60$ hasta $t = 170$ en intervalos de 10 minutos mostrados en la figura 46.

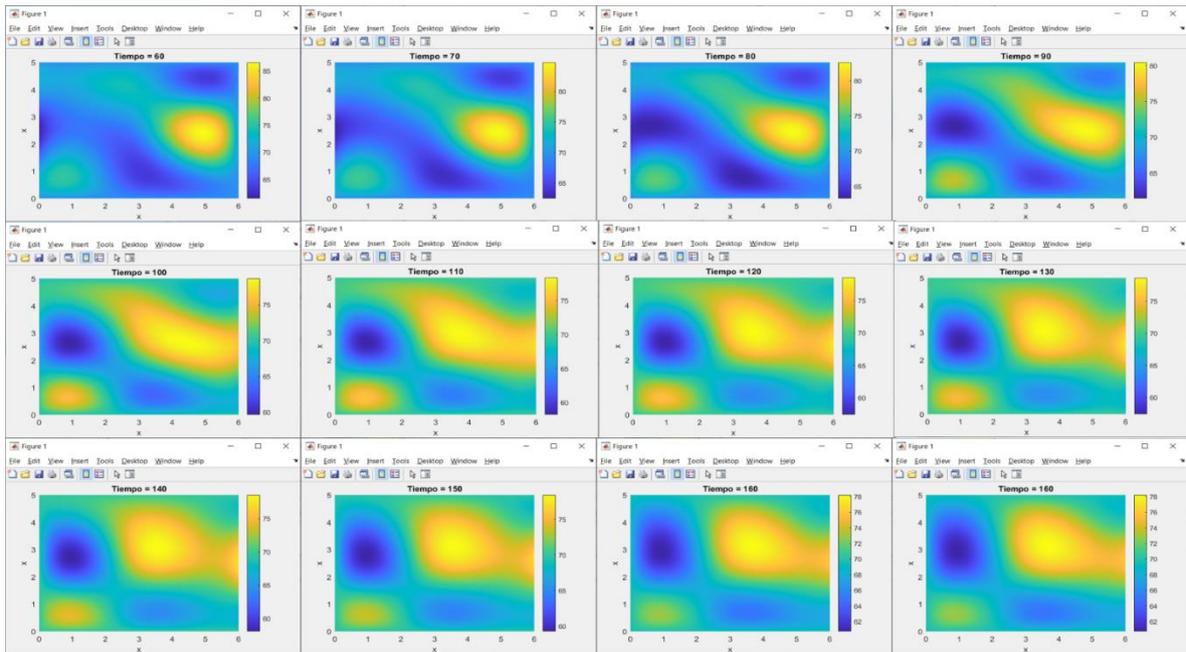


Figura 46. Mapas de ruido (dBA) correspondientes a $t=60, 70, 80, \dots, 170$ min.

Los mapas de ruido de curvas isófonas muestran los niveles de ruido en la ciudad con líneas de un mismo nivel sonoro. La figura 47 representa este tipo de mapa para $t = 90$ minutos.

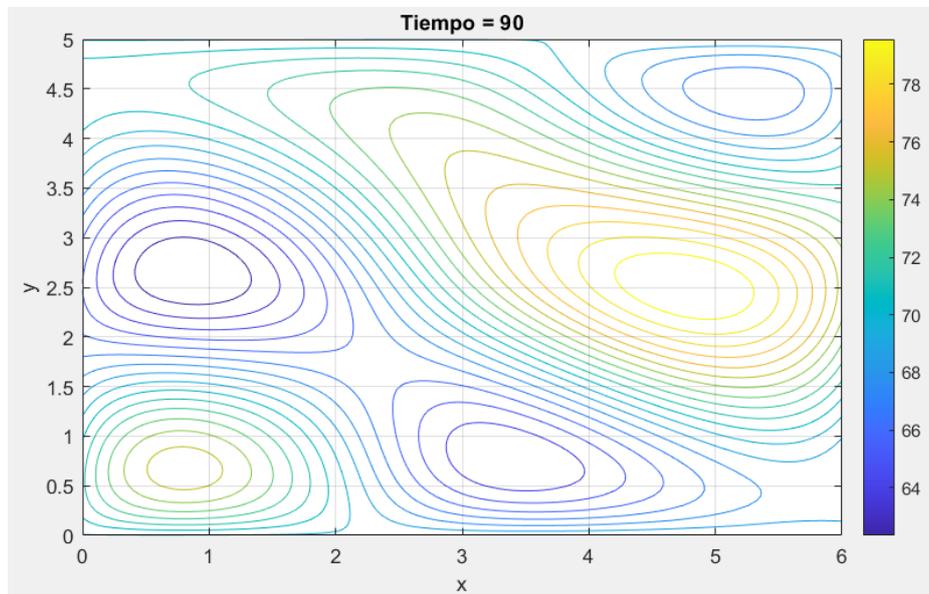


Figura 47. Mapa de ruido (dBA) de curvas isófonas en $t=90$ min.

5.1.7 Ejemplo 7: nube tóxica

Debido a un accidente se ha liberado una nube de dioxina tóxica (2,3,7,8-tetraclorodibenzo-p-dioxina) en una planta química en un recinto cerrado de $50 \times 60 \times 10$. Se desea evaluar la proporción del desastre. Mediante la utilización de drones se han recogido datos de concentración de la dioxina en kg/m^3 mostrados en la tabla 7.

Tabla 7. Concentración de dioxina en kg/m^3 para alturas 0, 2.5, 5, 7.5 y 10 m.

Altura z=0 m							
x/y	0	10	20	30	40	50	60
0	0,974	0,992	1,01	1,028	1,046	1,063	1,081
10	1,103	1,126	1,149	1,173	1,196	1,219	1,242
20	1,21	1,238	1,266	1,294	1,322	1,351	1,379
30	1,272	1,302	1,333	1,365	1,396	1,428	1,46
40	1,272	1,302	1,333	1,365	1,396	1,428	1,46
50	1,21	1,238	1,266	1,294	1,322	1,351	1,379

Altura z=2.5 m							
x/y	0	10	20	30	40	50	60
0	0,946	0,963	0,98	0,997	1,013	1,03	1,046
10	1,067	1,089	1,11	1,132	1,154	1,175	1,197
20	1,167	1,193	1,219	1,245	1,271	1,297	1,323
30	1,224	1,252	1,281	1,31	1,339	1,368	1,397
40	1,224	1,252	1,281	1,31	1,339	1,368	1,397
50	1,167	1,193	1,219	1,245	1,271	1,297	1,323

Altura z=5 m							
x/y	0	10	20	30	40	50	60
0	0,876	0,891	0,905	0,919	0,934	0,948	0,962
10	0,979	0,997	1,015	1,033	1,051	1,069	1,087
20	1,063	1,084	1,105	1,126	1,148	1,169	1,191
30	1,11	1,133	1,156	1,18	1,203	1,227	1,25
40	1,11	1,133	1,156	1,18	1,203	1,227	1,25
50	1,063	1,084	1,105	1,126	1,148	1,169	1,191

Altura z=7.5 m							
x/y	0	10	20	30	40	50	60
0	0,795	0,806	0,818	0,83	0,841	0,853	0,864
10	0,878	0,893	0,907	0,922	0,936	0,95	0,964
20	0,945	0,961	0,978	0,995	1,012	1,028	1,045
30	0,982	1	1,018	1,036	1,054	1,072	1,09
40	0,982	1	1,018	1,036	1,054	1,072	1,09
50	0,945	0,961	0,978	0,995	1,012	1,028	1,045

Altura z=10 m							
x/y	0	10	20	30	40	50	60
0	0,724	0,734	0,744	0,754	0,763	0,773	0,782
10	0,793	0,805	0,817	0,829	0,84	0,852	0,863
20	0,847	0,861	0,874	0,887	0,901	0,914	0,927
30	0,877	0,891	0,906	0,92	0,934	0,948	0,962
40	0,877	0,891	0,906	0,92	0,934	0,948	0,962
50	0,847	0,861	0,874	0,887	0,901	0,914	0,927

A partir de estos valores y aplicando el método de los splines tridimensionales se han obtenido las gráficas en seudocolores de la concentración correspondientes a las alturas 5, 5.5 y 6 m (ver figura 48) y la gráfica de líneas de contorno de la altura de 3 m (figura 49).

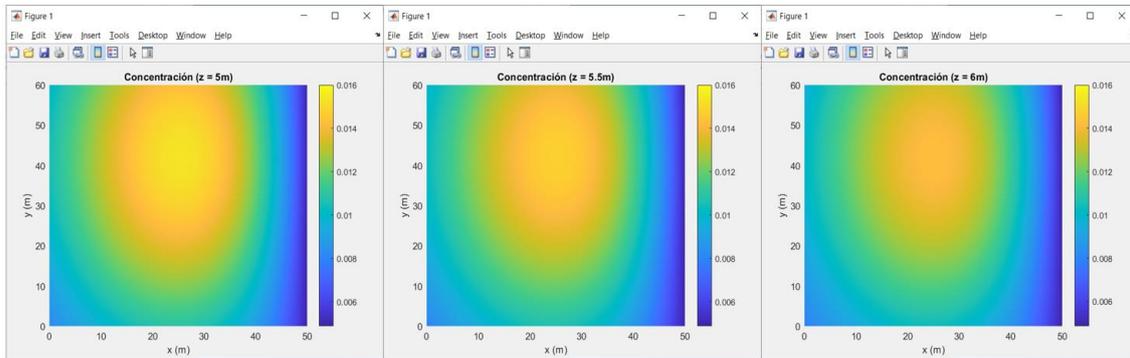


Figura 48. Gráfica de seudocolores de la concentración de dioxina (kg/m^3) a alturas 5, 5.5 y 6 m.

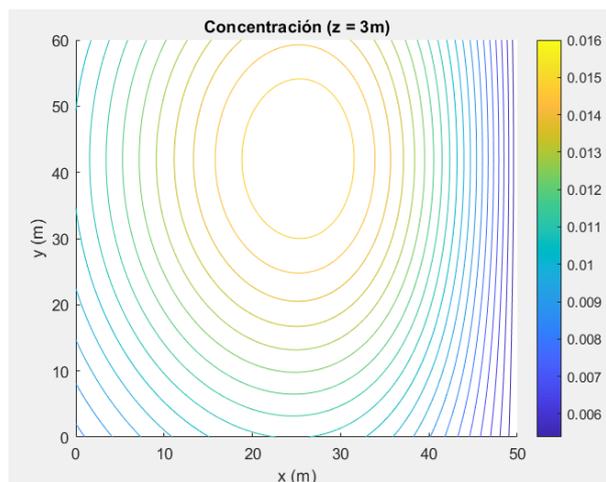


Figura 49. Gráfica de líneas de contorno de la concentración de dioxina (kg/m^3) a 3 m de altura.

La cantidad total de dioxina que se ha escapado puede calcularse de forma aproximada a partir de la integral triple

$$I = \int_0^{50} \int_0^{60} \int_0^{10} S(x, y, z) dx dy dz$$

siendo $S(x, y, z)$ el spline tridimensional. Este valor resulta ser de 361.7469 kg en donde se ha usado la función `integral3.m` de Matlab para el cálculo.

5.2 Aplicaciones de la aproximación mínimo-cuadrática por splines

5.2.1 Ejemplo 1: contaminación por ozono

El ozono troposférico es un contaminante secundario que se forma a partir de reacciones fotoquímicas complejas en condiciones de fuerte insolación entre contaminantes primarios como son los óxidos de nitrógeno (NO, NO₂) y compuestos orgánicos volátiles. En las ciudades es el tráfico rodado el principal responsable de su aparición (figura 50). A efectos de validación del método propuesto para aproximar datos usando la técnica de los splines y mínimos cuadrados (apartado 3.3 del capítulo 3 de esta memoria) se considera que una cierta estación de medición ha constatado que la concentración de ozono ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) viene expresada por la función dependiente del tiempo dada por

$$C(t) = 50 + \frac{75}{1 + 8\left(\frac{t-15}{10}\right)^2}$$

donde t se mide en días.



Figura 50. Contaminación por ozono troposférico

Se aplica el método de los splines y los mínimos cuadrados a partir de los datos de 61 puntos equidistantes del intervalo $[0,30]$ usando 11 puntos equidistantes. Las figuras 51 y 52 muestran la gráfica de la función $C(t)$, el spline y el polinomio de mínimos cuadrados que la aproxima y los errores correspondientes respectivamente.

Suponiendo que en las mediciones se presentan errores aleatorios de amplitud 5 y trabajando con 201 puntos equidistantes del intervalo $[0,30]$ y usando 31 puntos equidistantes, los resultados correspondientes se muestran en las figuras 53 y 54. Puede observarse que el spline aproxima mejor que el polinomio en ambos supuestos.

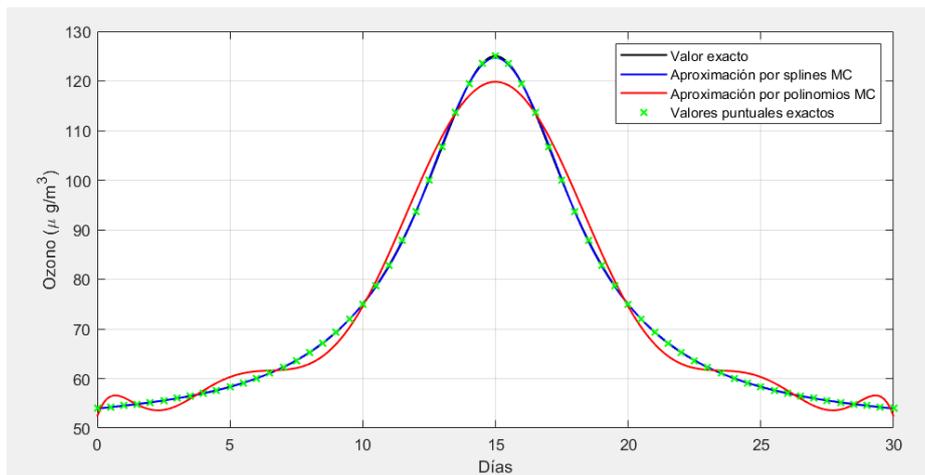


Figura 51. Aproximaciones por el spline y el polinomio de mínimos cuadrados.

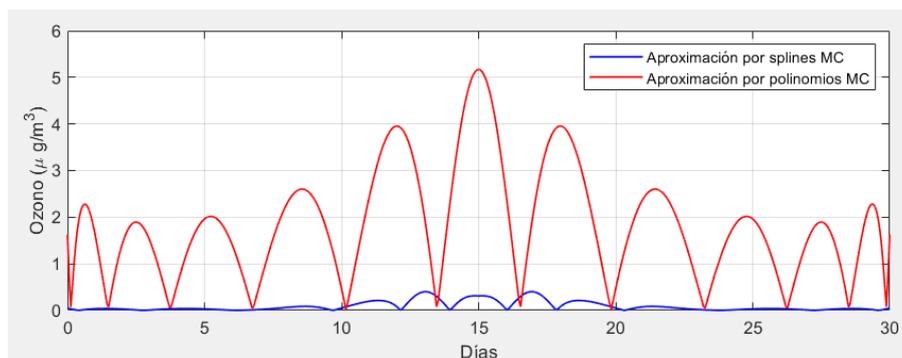


Figura 52. Errores de las aproximaciones por el spline y el polinomio de mínimos cuadrados.

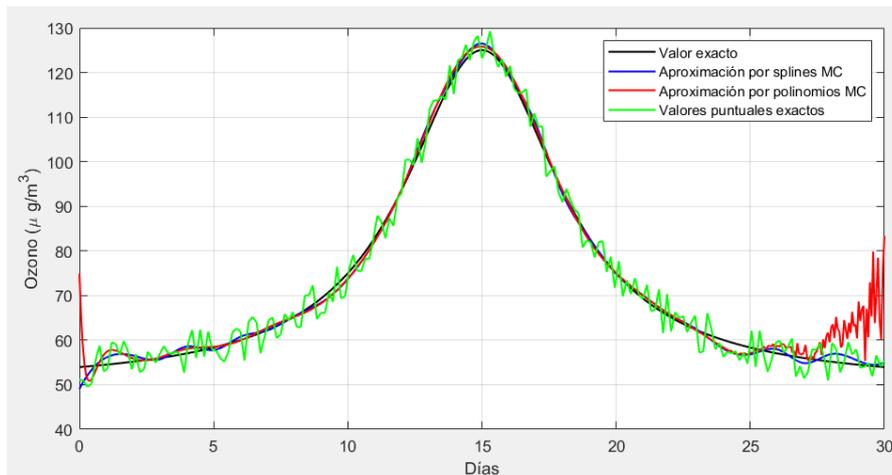


Figura 53. Aproximaciones por el spline y el polinomio de mínimos cuadrados en el caso de errores aleatorios.

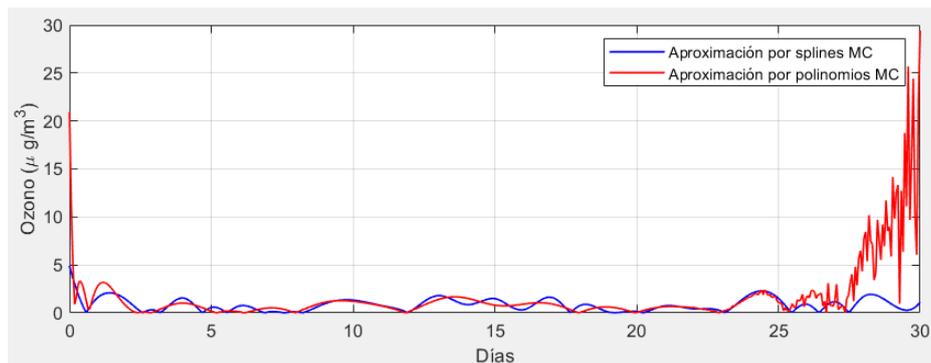


Figura 54. Errores en las aproximaciones por el spline y el polinomio de mínimos cuadrados en el caso de errores aleatorios.

5.2.2 Ejemplo 2: contaminación por CO_2

En el mercado existen una gran variedad de dispositivos que permiten controlar la concentración de dióxido de carbono (CO_2) en interiores de amplia utilización en oficinas, colegios, universidades, residencias y centros de salud.

Se considera el caso de las mediciones obtenidas a partir de un dispositivo defectuoso que registra valores de concentración de CO_2 con pequeños errores aleatorios recogidos en la tabla 8. La figura 56 muestra la gráfica de las aproximaciones dadas por el spline y el polinomio mínimo-cuadrático a partir de los valores de $t = 1, 10, 20, 30, \dots, 180 \text{ min}$.



Figura 55. Medidor de CO₂.

Tabla 8. Concentración de CO₂ en ppm (partes por millón).

t (min)	CO2 (ppm)										
1	459	31	583	61	646	91	603	121	679	151	823
2	461	32	586	62	645	92	602	122	682	152	827
3	464	33	590	63	644	93	601	123	686	153	830
4	466	34	595	64	643	94	600	124	690	154	834
5	470	35	599	65	642	95	599	125	694	155	837
6	473	36	603	66	640	96	598	126	698	156	840
7	477	37	606	67	637	97	597	127	702	157	843
8	481	38	610	68	635	98	597	128	707	158	847
9	484	39	613	69	633	99	598	129	713	159	849
10	488	40	616	70	631	100	599	130	718	160	852
11	493	41	619	71	628	101	601	131	722	161	854
12	497	42	621	72	626	102	604	132	728	162	857
13	500	43	623	73	623	103	606	133	734	163	859
14	505	44	625	74	620	104	609	134	740	164	861
15	510	45	627	75	619	105	614	135	747	165	863
16	515	46	628	76	617	106	618	136	751	166	865
17	520	47	630	77	614	107	621	137	757	167	867
18	523	48	631	78	613	108	626	138	764	168	869
19	528	49	633	79	611	109	631	139	770	169	869
20	533	50	635	80	610	110	636	140	774	170	871
21	538	51	636	81	609	111	641	141	780	171	872
22	543	52	638	82	608	112	644	142	785	172	873
23	546	53	639	83	608	113	648	143	790	173	873
24	551	54	641	84	607	114	652	144	795	174	873

25	556	55	643	85	607	115	656	145	798	175	874
26	560	56	644	86	607	116	660	146	803	176	874
27	564	57	645	87	606	117	663	147	807	177	873
28	568	58	646	88	606	118	667	148	812	178	873
29	573	59	646	89	605	119	671	149	816	179	872
30	578	60	646	90	605	120	675	150	819	180	871

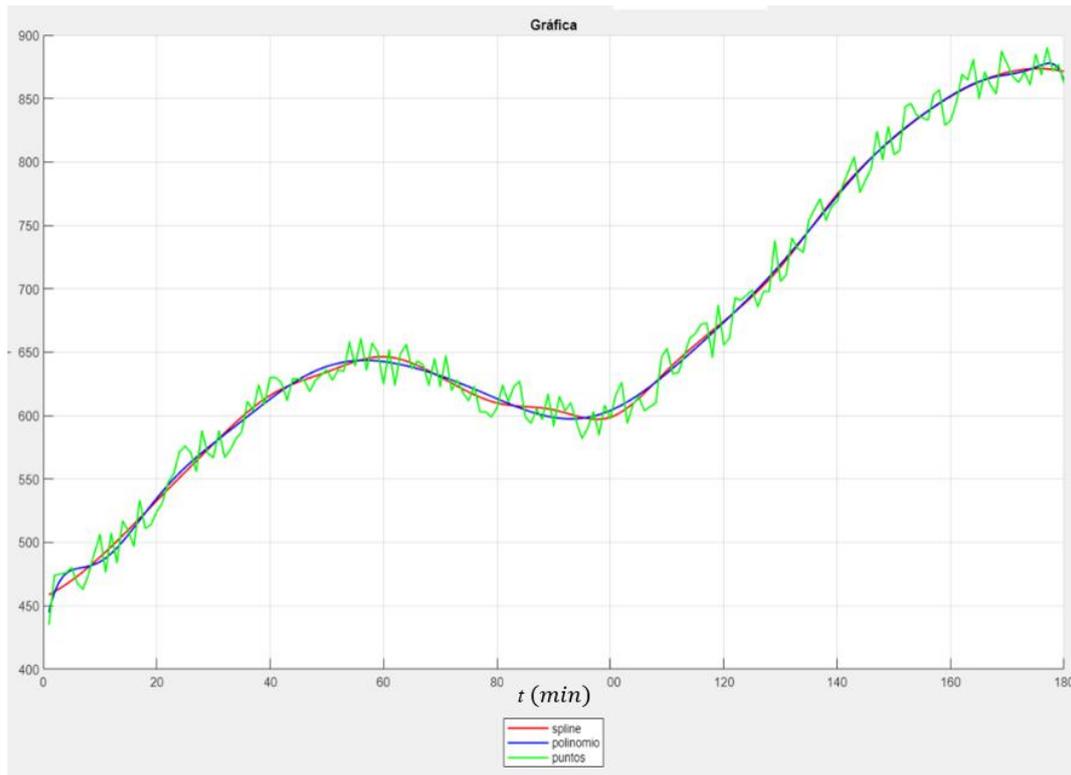


Figura 56. Aproximaciones de las concentraciones de CO_2 (ppm).

5.2.3 Ejemplo 3: contaminación por abonos, fertilizantes y pesticidas

El uso de abonos, fertilizantes y pesticidas en zonas cercanas a una albufera o lago puede suponer un grave problema de contaminación del agua. A efectos de valorar la aproximación por splines bidimensionales de mínimos cuadrados se supone que se han tomado muestras de la concentración de contaminante (mg/l), en 30×30 puntos equidistantes de un recinto cuadrado $[0,100] \times [0,100]$ (m) y que en dicho recinto la concentración viene dada por

$$C(x, y) = 3 + \text{sen} \left(\left(\frac{x - 40}{40} \right)^2 + 3 \left(\frac{y - 50}{40} \right)^2 \right), \quad (x, y) \in [0,100] \times [0,100]$$

La aproximación por splines bidimensionales de mínimos cuadrados usando 20×20 puntos equidistantes viene dada por la gráfica de la figura 57. El error cometido se muestra en la figura 58.

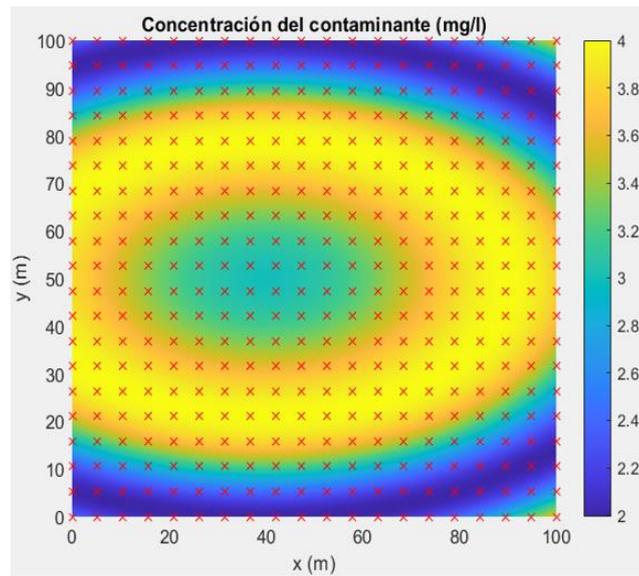


Figura 57. Aproximación de la concentración de contaminantes por splines BD.

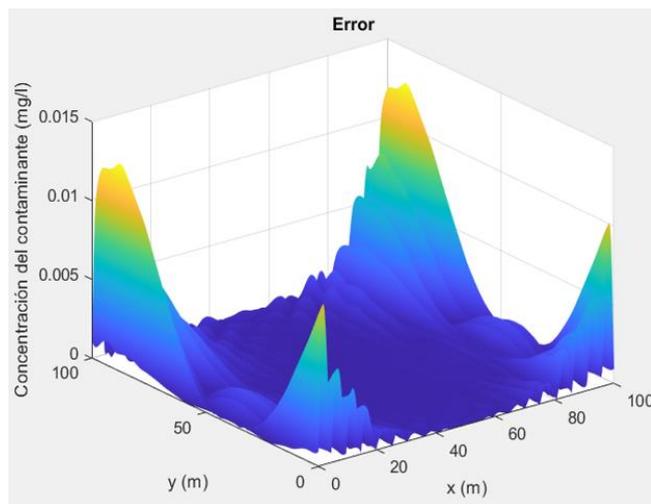


Figura 58. Error de la aproximación de la concentración de contaminantes (mg/l) por splines BD.

5.2.4 Ejemplo 4: contaminación por NO_2

El dióxido de nitrógeno NO_2 es un tipo de contaminante gaseoso que se produce como consecuencia del tráfico rodado, de las emisiones de las fábricas y centrales térmicas y de la quema de combustibles fósiles. Es un gas tóxico, de color amarillento, que es uno de los principales responsables de la lluvia ácida y potencia los niveles de las PM 2.5.

En este apartado se parte del supuesto de que las estaciones de medición de una zona de una ciudad mostradas en la figura 59 han proporcionado los datos de la tabla 9 ($\mu g/m^3$).

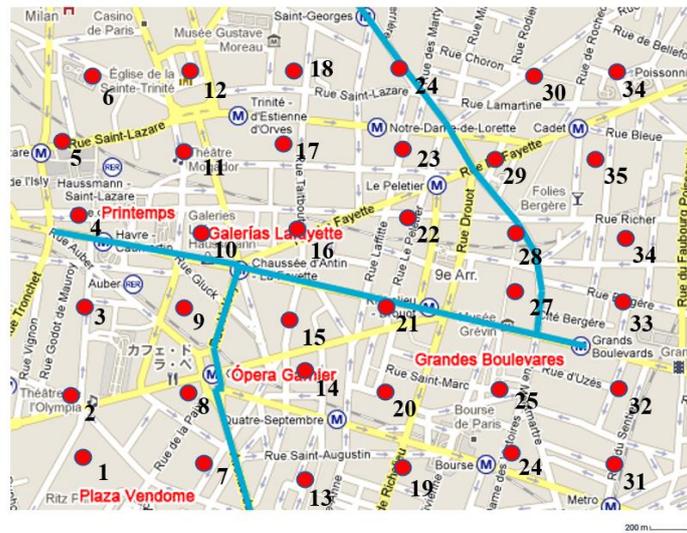


Figura 59. Estaciones de medición.

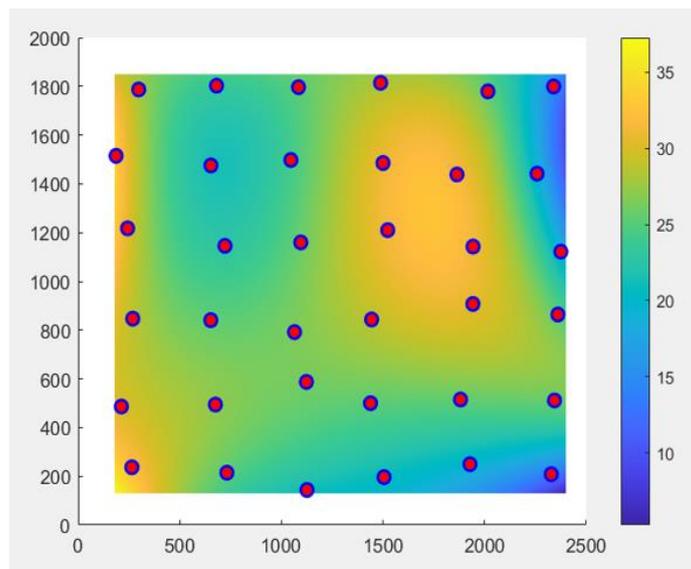


Figura 60. Gráfica de pseudocolores de la aproximación de la concentración de NO_2 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$).

Tabla 9. Mediciones de la concentración de NO_2 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$).

Punto	x (m)	y (m)	NO2
1	264,784	237	32
2	213,2	486,44	31
3	269,256	846,88	29
4	243,568	1217,48	29
5	186,836	1515,08	36
6	298,116	1787,36	26

7	732,212	214,72	23
8	675,532	494,4	30
9	652,964	840,8	24
10	722,54	1145,64	17
11	653,744	1475,6	24
12	681,148	1802,72	27
13	1125,956	144,08	23
14	1123,148	587,48	23
15	1064,596	791,88	32
16	1095,484	1159,84	26
17	1046,708	1497,96	25
18	1084,512	1796,68	16
19	1505,088	196,48	20
20	1438,632	500,08	24
21	1443,936	843,76	29
22	1523,132	1210,32	31
23	1500,096	1485,64	37
24	1488,344	1814,64	36
25	1927,536	249,76	16
26	1881,464	515,24	36
27	1941,94	907,28	17
28	1942,98	1142,6	37
29	1863,316	1438,64	28
30	2015,832	1779,4	19
31	2327,312	208,6	15
32	2343,432	511,28	21
33	2360,072	863,92	33
34	2374,944	1121,88	15
35	2257,476	1441,84	22
36	2339,064	1799,64	17

Si se aproximan los datos de la tabla por el spline bidimensional de mínimos cuadrados obtenido a partir de los valores $x = 180, 920, 1660$ y 2400 e $y = 130, 703.33, 1276$ y 1850 se obtienen las gráficas de seudocolores, líneas de contorno y superficie mostradas en las figuras 60, 61 y 62.

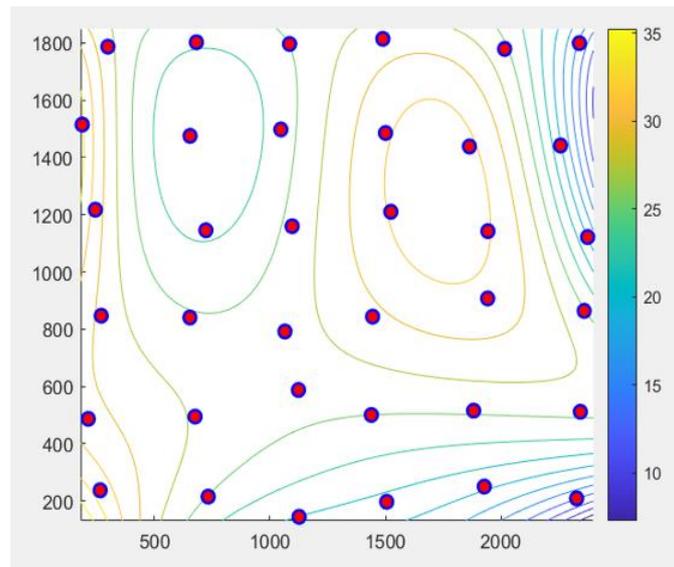


Figura 61. Gráfica de líneas de contorno de la aproximación de la concentración de NO₂ ($\mu\text{g}/\text{m}^3$).

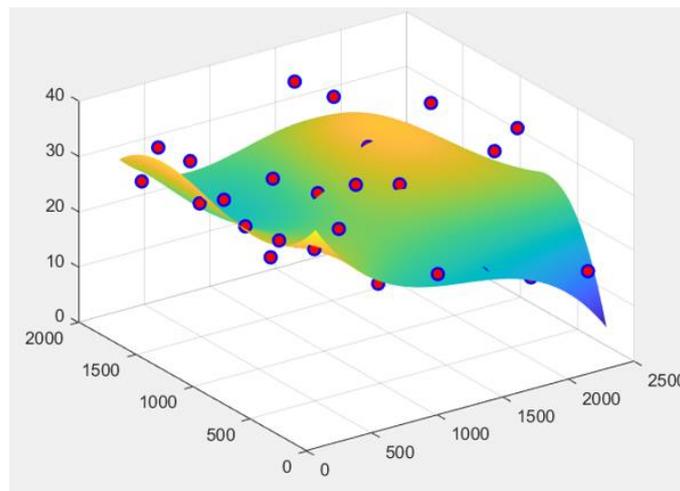


Figura 62. Gráfica de superficie de la aproximación de la concentración de NO₂ ($\mu\text{g}/\text{m}^3$).

5.3 Evaluación del método de resolución aproximada de la ecuación del transporte de contaminantes basado en splines multidimensionales

En lo que sigue se muestran diversos ejemplos de aplicación del método descrito en el apartado 2.3 a la resolución aproximada de problemas de contorno de las ecuaciones en derivadas parciales de 2º orden que modelizan la llamada ecuación del transporte de contaminantes o de advección-difusión y el caso estacionario. Se trataría de evaluarlo y validarlo a partir de algunos casos donde es conocida la solución.

5.3.1 Ejemplo 1

Se desea estudiar el siguiente caso, en el que existe una inyección instantánea, continua y puntual en $x = 0$ de contaminante:

$$\begin{aligned}
 D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial C}{\partial t} &= 0 \\
 C(0, x) &= 0, x \geq 0 \\
 C(t, 0) &= C_0, t \geq 0 \\
 C(t, \infty) &= 0, t \geq 0
 \end{aligned}
 \tag{5.1}$$

donde C es la concentración de contaminante (kg/m^3), u la velocidad media de la corriente (m/s), D el coeficiente de dispersión longitudinal (m^2/s), x la distancia (m), y t el tiempo (s). Obsérvese que, si se supone que u y D son constantes, la ecuación (5.1) se obtiene de la ecuación (3.4) tomando $A = 1$ y $R = 0$.

El contaminante también se desplaza aguas arriba, con lo cual la ecuación también tiene solución para $x < 0$ con sus correspondientes condiciones iniciales y de contorno. Con un rango tan pequeño de simulación de 1 m no se aprecia en $x > 0$ el efecto de la dispersión sobre todo teniendo en cuenta que u es grande respecto de D . Lo interesante de esta ecuación es observar que para $x < 0$ aparece contaminante a pesar de que el agua se desplaza en sentido contrario.

Su solución analítica es conocida (García, 2004), tomada de (Ogata y Banks, 1961):

$$C_e(t, x) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - ut}{2\sqrt{Dt}} \right) + \exp \left(\frac{ux}{D} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x + ut}{2\sqrt{Dt}} \right) \right]$$

siendo erfc la función error complementaria definida por

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{+\infty} e^{-t^2} dt$$

Se considera el caso en que $u = 1 \text{ m/s}$ y $D = 1 \text{ m}^2/\text{s}$ con $t \in [0,1]$, $x \in [0,2]$ y las condiciones iniciales (Dirichlet)

$$\begin{aligned}
 C(0, x) &= 0, \quad x \geq 0 \\
 C(t, 0) &= C_0 = 4, \quad t \geq 0 \\
 C(t, 2) &= C_e(t, 2), \quad t \geq 0
 \end{aligned}$$

Para obtener la solución aproximada a partir del mallado de la figura 63, se utiliza la sentencia de Matlab

```
u = transportel_aux(alfa,beta,C0,R,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx)
```

donde

```
tt = [0 0.01 0.02 0.03 0.05 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1];
xx = [0 0.01 0.02 0.03 0.05 0.1 0.2 0.4 0.6 0.8 1 1.2 1.4 1.6 1.8 2];
A = '1';
dtA = '0';
dxA = '0';
U = '1';
```

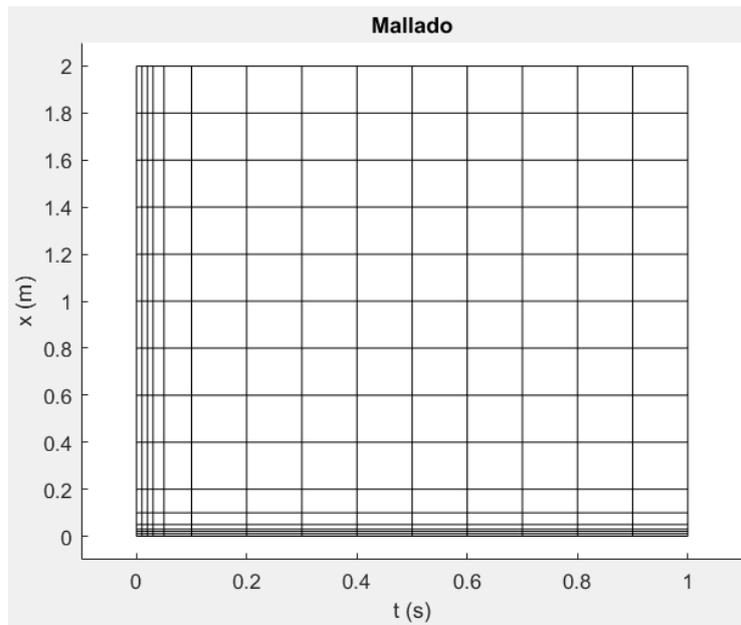


Figura 63. Mallado usado en el ejemplo 1.

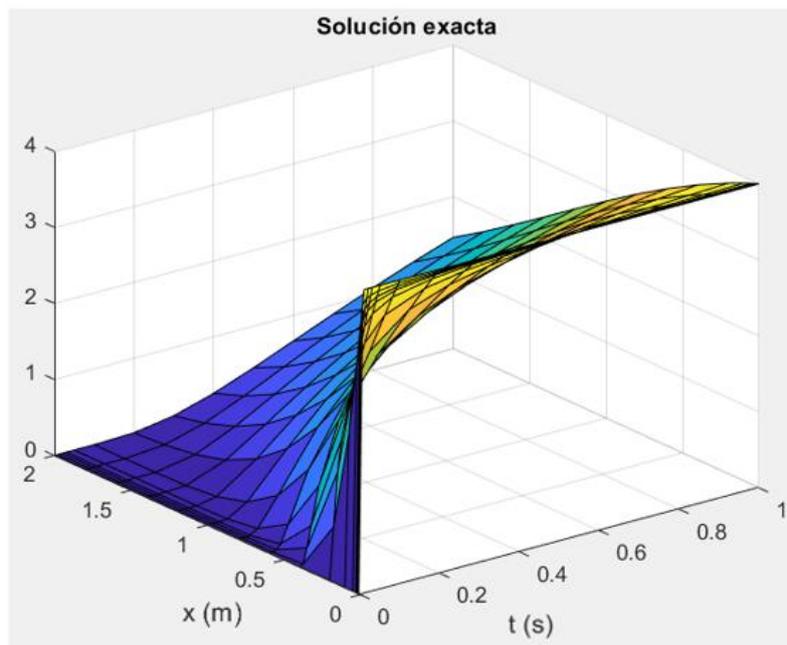


Figura 64. Solución exacta para C (kg/m³).

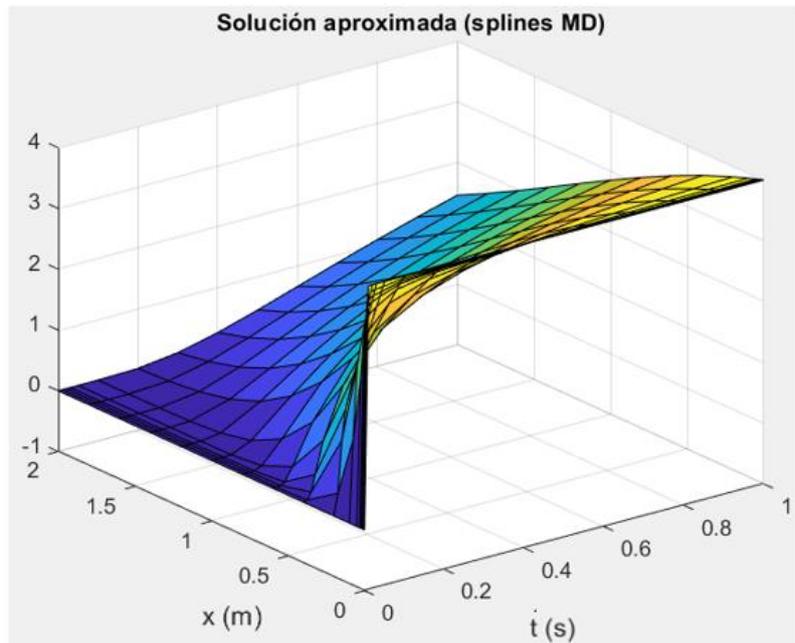


Figura 65. Solución aproximada para C (kg/m^3) por splines MD.

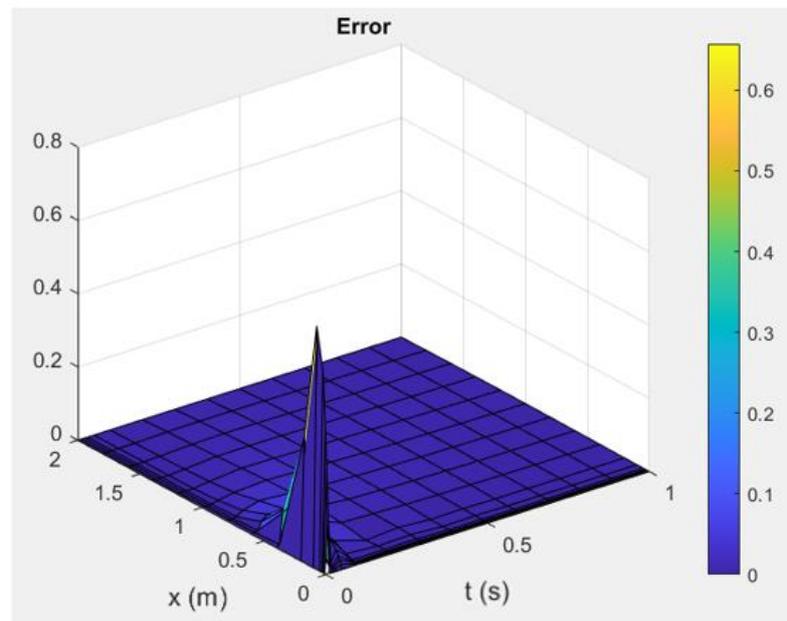


Figura 66. Gráfica del error cometido para C (kg/m^3).

```
dxU = '0';  
D = '1';  
dxD = '0';  
C0 = '0';  
R = '0';  
alfa = '4';  
beta = 'Cexacta(4,1,1,t,2)';
```

donde **Cexacta.m** es la función de Matlab que viene dada por

```
function z = Cexacta(C_0,v,D,t,x)
z = C_0/2*(erfc((x-v*t)/(2*sqrt(D*t)))+ exp(v*x/D)*erfc((x+v*t)/(2*sqrt(D*t))));
end
```

Las figuras 64, 65 y 66 presentan las gráficas de la solución exacta, la aproximada usando el método de los splines multidimensionales (MD) y la del error cometido respectivamente.

Si se usa el método de las diferencias finitas (DF) con 15 nodos equidistantes para el eje x y otros 15 para el eje y no hay convergencia (ver la figura 67). Para obtener buenos resultados por este método se necesitan para 15 nodos equidistantes para el eje x al menos 100 para el eje y (ver figura 68).

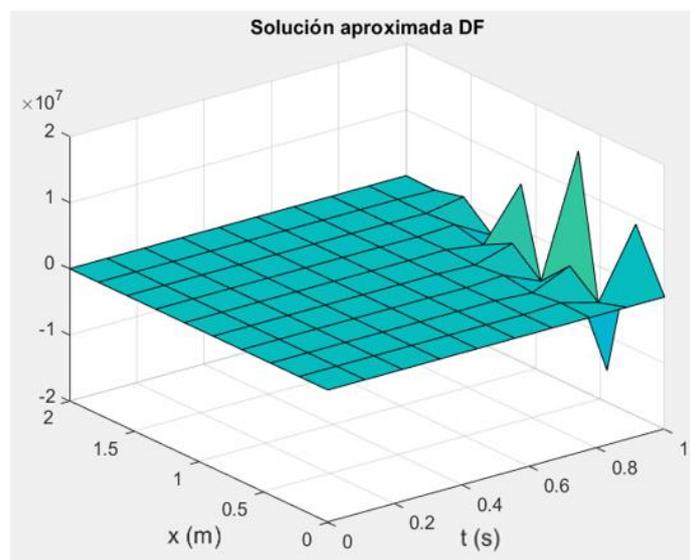


Figura 67. Solución aproximada para C (kg/m^3) por el método de las DF con 15×15 nodos.

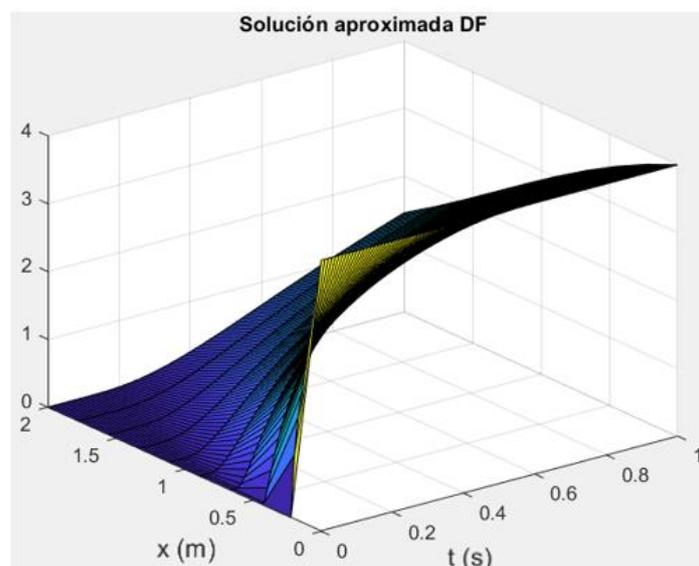


Figura 68. Solución aproximada para C (kg/m^3) por el método de las DF con 15×100 nodos.

5.3.2 Ejemplo 2

A efectos puramente de evaluación y validación del método de los splines multidimensionales se procede a considerar condiciones de Dirichlet para la ecuación del transporte (3.4) con los siguientes valores para cada una de las funciones involucradas:

$$A(t, x) = 1, u(t, x) = 1 + 0.1t, D(t, x) = 1$$

$$R(t, x) = \frac{20tx^2 - 2x(t^3 + 10t^2 + 11t + 10) + (t + 30)(t^2 + 1)}{10(t^2 + 1)^2}$$

$$\alpha(t) = 0, \beta(t) = 0, C_0(x) = x(1 - x)$$

con $t \in [0, 2]$ y $x \in [0, 1]$ donde el tiempo está medido en segundos y el espacio en metros. La expresión de R puede resultar físicamente extraña. Se asume un aporte distribuido de contaminante al estuario con una distribución espacial y temporal determinada por esta función.

La solución exacta es

$$C_e(t, x) = \frac{x(1 - x)}{1 + t^2}$$

Para obtener la solución aproximada por el método de los splines multidimensionales se utiliza un malla con 10×10 nodos equidistantes y valores

```
tt = linspace(0,2,10);
xx = linspace(0,1,10);
A = '1';
dtA = '0';
dxA = '0';
U = '1+0.1*t';
dxU = '0';
D = '1';
dxD = '0';
C0 = 'x*(1-x)';
R = '(20*t*x^2-2*x*(t^3+10*t^2+11*t+10)+(t+30)*(t^2+1))
/(10*(t^2+1)^2)';
alfa = '0';
beta = '0';
Cexacta = 'x*(1-x)/(1+t^2)'
```

Las gráficas de la solución exacta, de la aproximada y del error se muestra en las figuras 69, 70 y 71.

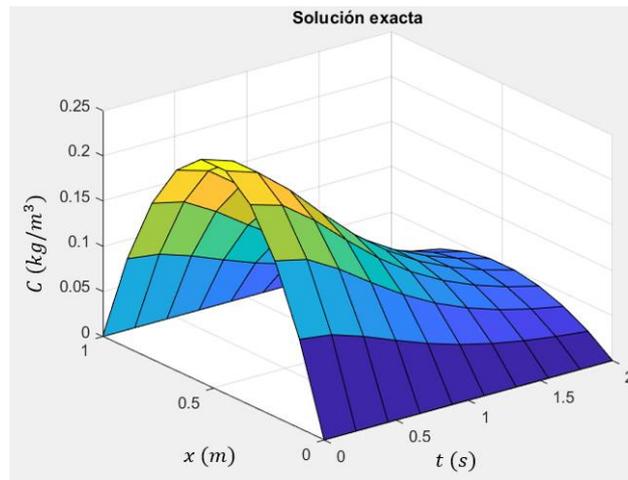


Figura 69. Solución exacta.

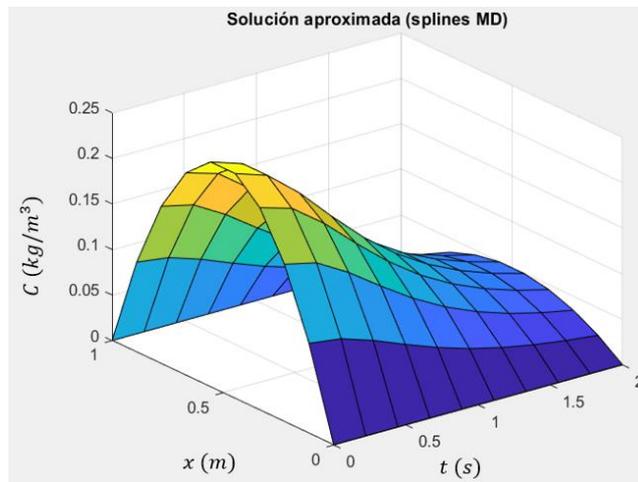


Figura 70. Solución aproximada por splines MD.

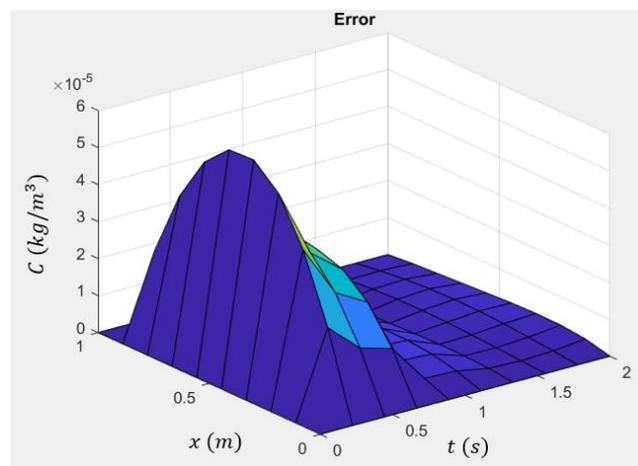


Figura 71. Error de la solución aproximada por splines MD.

5.3.3 Ejemplo 3

Se considera ahora la ecuación (3.4) y condiciones de Neumann (ver el apartado 3.4.2) con

$$A(t, x) := 1, D(t, x) := 0, u(t, x) := 1, C_0(x) := 1 + \text{sen}(2\pi x)$$

$$\alpha(t) = e^{-t}, \beta(t) = 2\pi e^{-t} \cos(2\pi x)$$

$$R(t, x) = e^{-t}(2\pi \cos(2\pi x) + (4\pi^2 - 1)\text{sen}(2\pi x) - 1)$$

donde el tiempo está medido en segundos y el espacio en metros.

La solución exacta es $C_e(t, x) := e^{-t}(1 + \text{sen}(2\pi x))$. Se trabaja con $t \in [0, 2]$ y $x \in [0, 1]$.

En este caso se usa un mallado con 10×10 nodos equidistantes

`C = transporte2_aux(alfa,beta,C0,R,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx)`

con

```
tt = linspace(0,2,10);
xx = linspace(0,1,10);
A = '1';
dtA = '0';
dxA = '0';
U = '1+0.1*t';
dxU = '0';
D = '1';
dxD = '0';
C0 = 'x*(1-x)';
R = '(20*t*x^2-2*x*(t^3+10*t^2+11*t+10)+(t+30)*(t^2+1))/(10*(t^2+1)^2)';
alfa = '0';
beta = '0';
```

Las figuras 72, 73 y 74 muestran la solución exacta, la aproximada por el método de los splines multidimensionales y la gráfica del error cometido respectivamente.

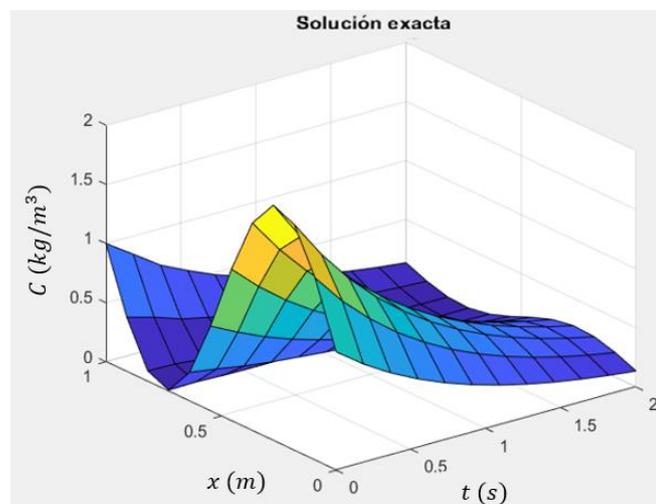


Figura 72. Solución exacta.

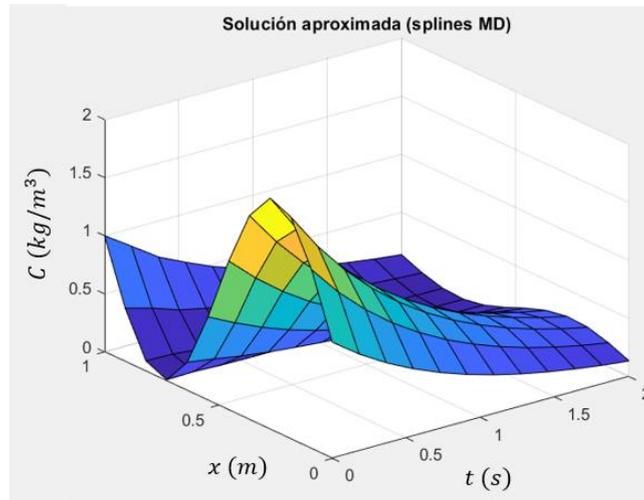


Figura 73. Solución aproximada por splines MD.

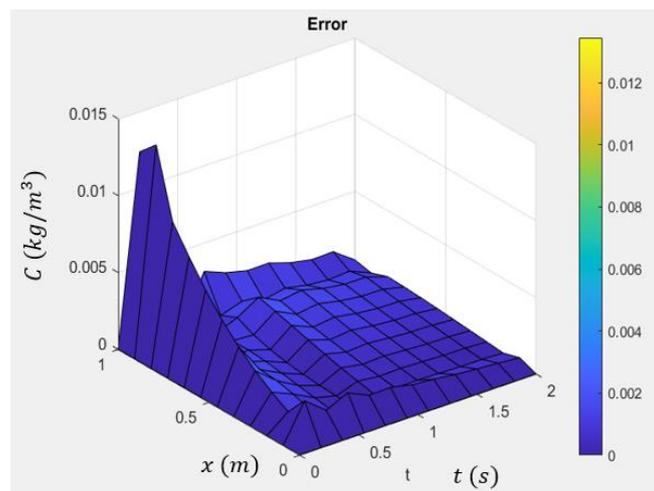


Figura 74. Error de la solución aproximada por splines MD.

5.3.4 Ejemplo 4

En el siguiente ejemplo se considera que las funciones involucradas en la ecuación del transporte de contaminantes no se conocen explícitamente, pero si se dispone de una tabla de datos con sus valores obtenidos experimentalmente. Parcialmente los datos utilizados se corresponden con los que se encuentran en el trabajo (Claros et al, 2018).

Se trata de resolver de manera aproximada la ecuación en derivadas parciales

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial C}{\partial t} = 0$$

con condiciones de Dirichlet. Experimentalmente se ha obtenido que la velocidad media de la corriente es $u = 1.06 \text{ m/s}$. El valor del coeficiente de dispersión longitudinal lo calcularemos a partir de la siguiente fórmula propuesta por Fisher, citado en (Chapra, 1997):

$$D = \frac{0.011}{H\sqrt{gHS}}u^2B^2$$

donde H es la profundidad media de la corriente de agua, $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ es la aceleración de la gravedad, S es la pendiente longitudinal del cauce (adimensional) y B es el ancho del cauce (m). Trabajaremos con $t \in [0,20]$ y $x \in [0,30]$. Se sabe que la pendiente es constante e igual a $S = 0.65\%$. Los valores de H y B en el tramo $[0,30]$ vienen recogidos en la tabla 10, junto con el coeficiente de dispersión longitudinal.

La concentración inicial es $C_0 = 0 \text{ kg/m}^3$ y que $\alpha(t) = 3 \text{ kg/m}^3$ y $\beta(t) = 0.2 \text{ kg/m}^3$. Con estas condiciones se obtienen los resultados mostrados en la gráfica 75 utilizando

```
C = transporte3_aux(alfa,beta,C0,R,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx)
```

siendo

```
tt = linspace(0,20,11);
xx = linspace(0,30,11);
H = [1.3 1.34 1.32 1.27 1.27 1.26 1.18 1.20 1.21 1.24 1.24];
```

Tabla 10. Mediciones correspondientes al ejemplo 4.

Distancia (m)	Profundidad media (m)	Ancho de cauce (m)	Coficiente de dispersión (m ² /s)
0	1.30	4.62	0.0705
3	1.34	4.54	0.0650
6	1.32	4.53	0.0662
9	1.27	4.53	0.0702
12	1.27	4.50	0.0693
15	1.26	4.52	0.0707
18	1.18	4.52	0.0780
21	1.20	4.60	0.0788
24	1.21	4.58	0.0771
27	1.24	4.60	0.0750
30	1.24	4.61	0.0753

```
B = [4.62 4.54 4.53 4.53 4.50 4.52 4.52 4.60 4.58 4.60 4.61];
u = 1.06;
S = 0.65;
D = 0.011./(H.*sqrt(9.81*H*S)).*u^2.*B.^2;
A = ones(1,11);
dtA = zeros(1,11);
dxA = zeros(1,11);
U = 1.06*ones(1,11);
dxU = zeros(1,11);
dxD = zeros(1,11);
```

```
C0 = zeros(1,11);
R = zeros(1,11);
alfa = 3*ones(1,11);
beta = 0.2*ones(1,11);
```

Los resultados de la aproximación usando 11 nodos equiespaciados par el tiempo se muestran en la figura 75.

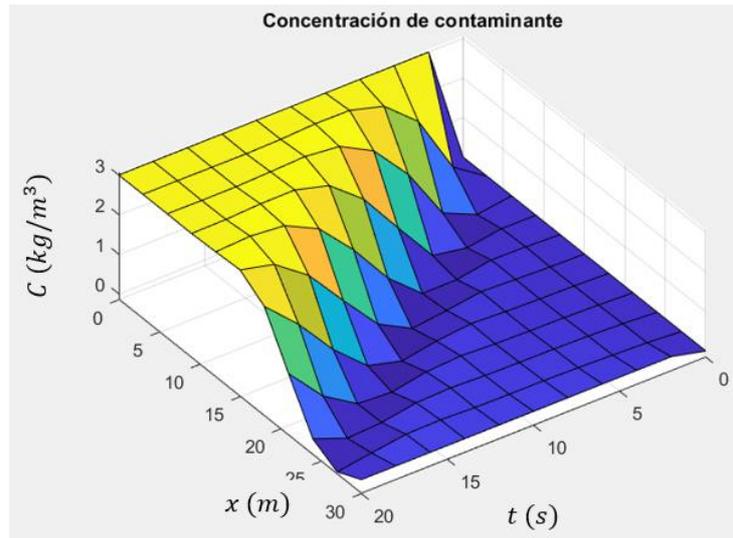


Figura 75. Solución aproximada por splines MD.

5.3.5 Ejemplo 5

En un determinado punto de un río se realiza un vertido puntual y constante de materia orgánica (W_L mg/l). El efecto del vertido en la concentración de materia orgánica (L) y oxígeno (O_2) disuelto en agua puede estudiarse, en estado estacionario, considerando las ecuaciones de balance (Chapra, 1997):

$$E \frac{d^2L}{dx^2} - u \frac{dL}{dx} - k_1L = 0 \quad (5.2)$$

$$E \frac{d^2[O_2]}{dx^2} - u \frac{d[O_2]}{dx} + k_2([O_2]_{\text{sat}} - [O_2]) - k_1L = 0 \quad (5.3)$$

donde x es la distancia al punto de vertido, E es el coeficiente de dispersión, u es la velocidad del río, k_1 es la velocidad de degradación de materia orgánica, k_2 es la velocidad de reaeración superficial y $[O_2]_{\text{sat}}$ es la concentración de saturación del oxígeno. Las hipótesis para simplificar la ecuación general del transporte y llegar a la ecuación (5.2) son:

- Se considera mezcla completa en la sección transversal a la dirección x , es decir la concentración C es constante en la sección transversal y solo depende de x .
- Velocidad del agua u y coeficiente de dispersión E , constantes.
- La materia orgánica es degradada por los microorganismos según una cinética de orden 1: $-k_1L$.
- Se busca la solución en el estado estacionario.

Si llamamos

$$D = [O_2]_{\text{sat}} - [O_2]$$

(déficit de oxígeno disuelto) entonces (5.3) se escribe

$$E \frac{d^2 D}{dx^2} - u \frac{dD}{dx} - k_2 D + k_1 L = 0 \quad (5.4)$$

Se consideran las condiciones iniciales de Dirichlet para L :

$$L(0) = L_0, \quad L(\pm\infty) = 0$$

donde $L_0 = \frac{W_L}{\alpha_r Q}$ (siendo Q el caudal) y $\alpha_r = \sqrt{1 + \frac{4k_1 E}{u^2}}$ y para D :

$$D(0) = D_0, \quad D(\pm\infty) = 0$$

donde $D_0 = \frac{W_{O_2}}{\alpha_s Q}$, $\alpha_s = \sqrt{1 + \frac{4k_2 E}{u^2}}$ y W_{O_2} es la carga de O_2 aportada por el vertido en $x = 0$ (masa de O_2 aportado por unidad de tiempo). Si se supone que E y u son constantes, entonces las ecuaciones de balance pueden resolverse de forma analítica. En concreto se tiene que

$$L(x) = L_e(x) = \begin{cases} L_0 e^{r_1 x} & x < 0 \\ L_0 e^{r_2 x} & x \geq 0 \end{cases}$$

donde $r_1 = \frac{u}{2E}(1 + \alpha_r)$ y $r_2 = \frac{u}{2E}(1 - \alpha_r)$.

Para el déficit de oxígeno disuelto

$$D(x) = D_e(x) = \begin{cases} \left(D_0 - \frac{k_1 L_0}{k_2 - k_1} \right) e^{s_1 x} + \frac{k_1 L_0}{k_2 - k_1} e^{r_1 x} & x < 0 \\ \left(D_0 - \frac{k_1 L_0}{k_2 - k_1} \right) e^{s_2 x} + \frac{k_1 L_0}{k_2 - k_1} e^{r_2 x} & x \geq 0 \end{cases}$$

donde $s_1 = \frac{u}{2E}(1 + \alpha_s)$, $s_2 = \frac{u}{2D}(1 - \alpha_s)$ y $\alpha_s = \sqrt{1 + \frac{4k_2 E}{u^2}}$.

Se consideran los valores del coeficiente de dispersión $E = 10 \text{ m}^2/\text{s}$, velocidad $u = 1.2 \text{ m/s}$, constantes $k_1 = 0.01 \text{ s}^{-1}$, $k_2 = 0.02 \text{ s}^{-1}$, $D_0 = 4 \text{ mg/l}$, $L_0 = 50 \text{ mg/l}$ y $[O_2]_{\text{sat}} = 15 \text{ mg/l}$.

Se aplica el método de los splines y el de diferencias finitas al PVI (5.2) en los intervalos $[-70,0]$ y $[0,800]$ (en km) tomando como condiciones iniciales $L(-70) = L_e(-70)$ y $L(0) = L_0$ en el primer caso y $L(0) = L_0$ y $L(800) = L_e(800)$ en el segundo y trabajando con 20 puntos equidistantes para cada intervalo. Las siguientes gráficas muestran en el intervalo $[-70,800]$ la solución exacta, la solución aproximada por el método de los splines y la solución aproximada por el método de las diferencias finitas (figura 76), y el error cometido con ambos métodos (figura 77).

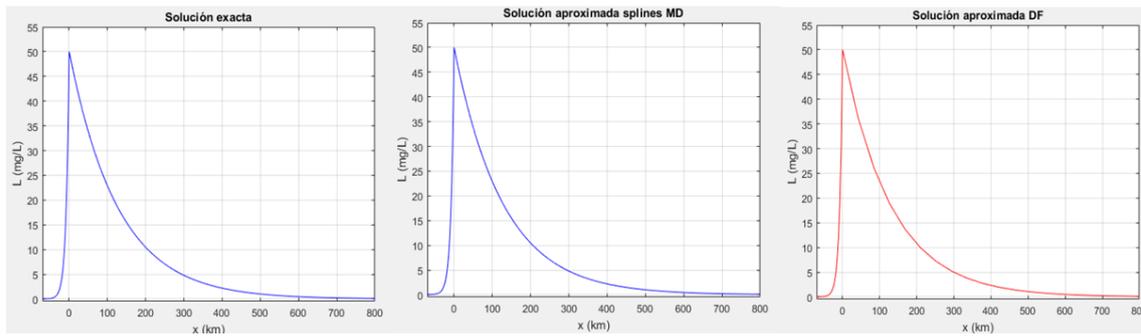


Figura 76. Solución exacta, aproximada por splines MD y aproximada por DF para la concentración de materia orgánica.

De forma análoga a como se ha procedido antes, si se aplican los métodos al PVI (5.4) con condiciones iniciales $D(-70) = D_e(-70)$ y $D(0) = D_0$ en el primer caso y $D(0) = D_0$ y $D(800) = D_e(800)$ en el segundo, y trabajando con 20 puntos equidistantes para cada intervalo se obtienen las siguientes gráficas para

$$[O_2] = [O_2]_{\text{sat}} - D$$

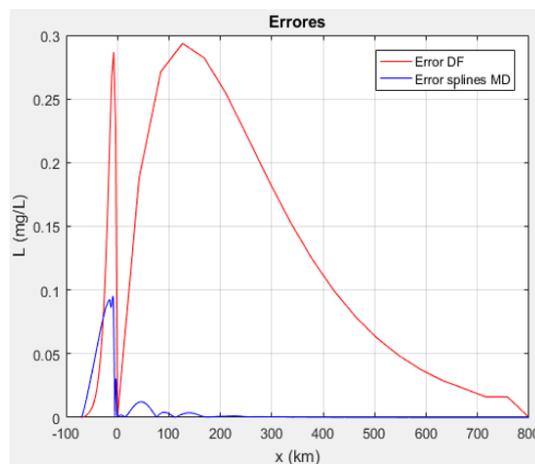


Figura 77. Gráfica de los errores cometidos por splines MD y DF para la concentración de materia orgánica.

correspondientes a la solución exacta, la solución aproximada por el método de los splines y la solución aproximada por el método de las diferencias finitas (figura 78). La figura 79 representa gráficamente al error cometido con ambos métodos.

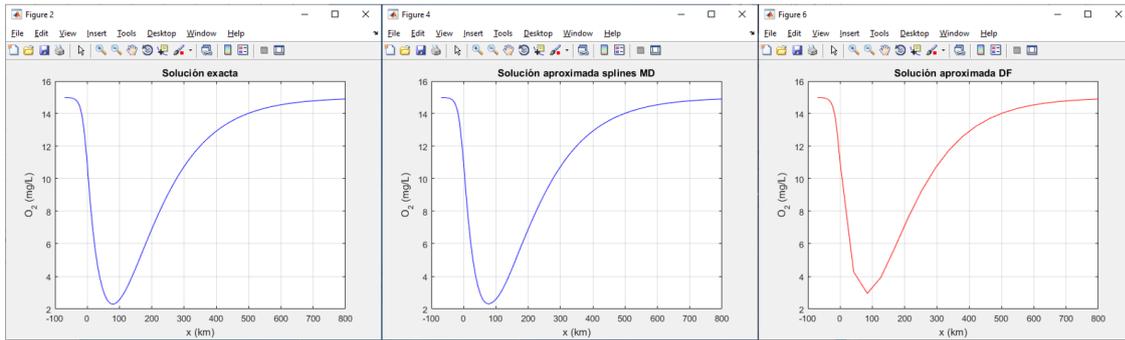


Figura 78. Solución exacta, aproximada por splines MD y aproximada por DF para el oxígeno.

Puede observarse que, con el mismo número de nodos, el método de los splines es notablemente más preciso que el de las diferencias finitas.

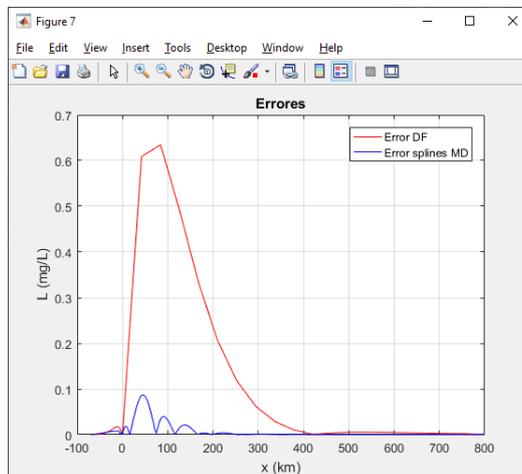


Figura 79. Gráfica de los errores cometidos por splines MD y DF del ejemplo 5.

5.3.6 Ejemplo 6

Se considera ahora el caso en el que se está produciendo un vertido puntual y constante de materia orgánica en un río del cual se conocen en el tramo $[0,300]$ valores de E y u mostrados en la tabla 11, que $k_1 = 0.01$, $k_2 = 0.02$, $D_0 = 4 \text{ mg/l}$, $L_0 = 50 \text{ mg/l}$ y $[O_2]_{\text{sat}} = 15 \text{ mg/l}$.

Aplicando los métodos de splines y diferencias finitas tomando $L(300) = 5$ y $D(300) = 1$ se obtienen las gráficas mostradas en las figuras 80 y 81.

Tabla 11. Valores de E y u en el tramo del río considerado.

Distancia	E	u
0	100.000	17.200
125	100.139	17.198
250	100.554	17.169

375	101.237	17.045
500	102.150	16.714
625	103.200	16.042
750	104.207	14.902
875	104.890	13.241
1000	104.893	11.172
1.125	103.890	0.9059
1250	101.779	0.7527
1.375	98.911	0.7320
1500	96.216	0.8932
1.625	95.001	12.110
1750	96.281	15.542
1.875	99.834	17.197
2000	103.683	15.582
2.125	104.925	11.335
2250	102.061	0.7644
2.375	97.164	0.8082
2500	95.033	12.776
2.625	98.444	16.952
2750	103.848	15.393
2.875	104.243	0.9556
3000	98.560	0.7412

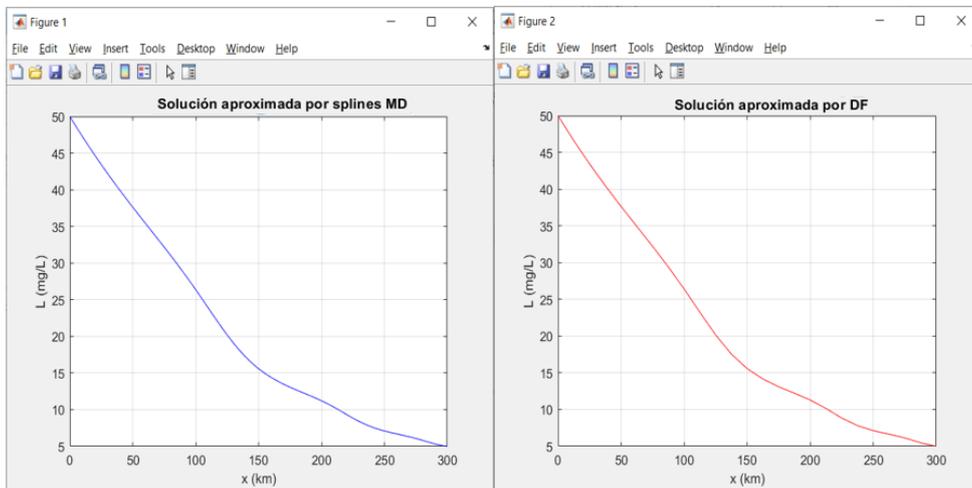


Figura 80. Gráfica de $L(x)$ aproximada por splines MD y por DF.

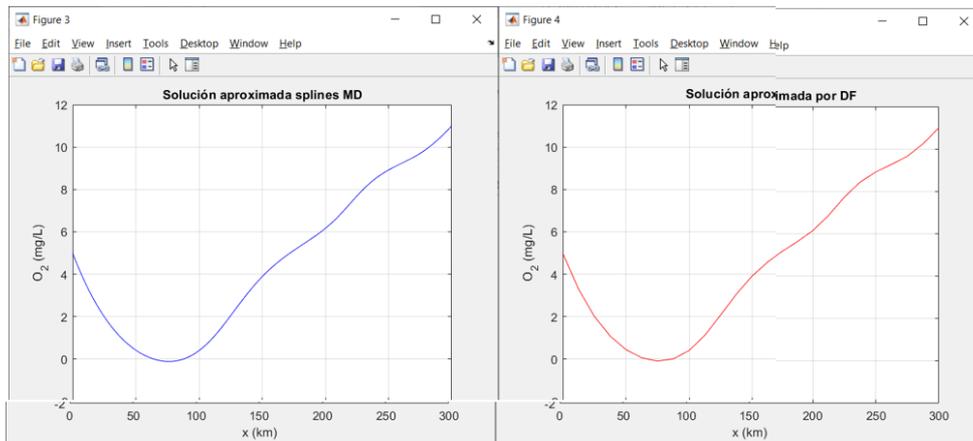


Figura 81. Gráfica de $O_2(x)$ aproximada por splines MD y por DF.

5.3.7 Ejemplo 7

Se considera la ecuación del transporte de contaminantes correspondiente al estado estacionario

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (5.1)$$

suponiendo que D y u son constantes con $D = 20 \text{ m}^2/\text{s}$ y $u = 3 \text{ m/s}$. Se usan 40 puntos equidistantes del intervalo $[0,100]$ (en kilómetros) con las condiciones iniciales $C(0) = 12$ y $C(100) = 0$. La solución exacta es

$$y_e(x) = \frac{12}{1 - e^{100u/d}} (e^{u x/d} - e^{100u/d})$$

Las figuras 82 y 83 muestran las aproximaciones dadas por el método de los splines y el de las diferencias finitas y el error cometido.

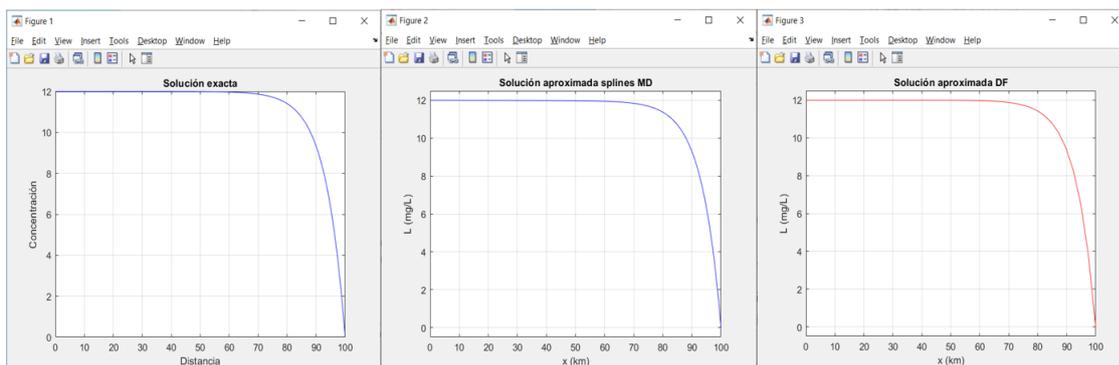


Figura 82. Gráficas de la concentración de contaminante exacta, aproximada por splines MD y aproximada por DF.

Observése que ambos métodos proporcionan buenos resultados. Si el llamado número de Péclet $Pe = \frac{u}{D}$ (que relaciona los tiempos de advección y de difusión) es grande ambos métodos proporcionan malos resultados.

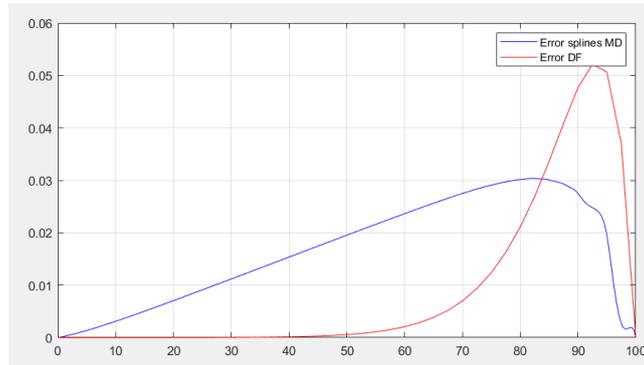


Figura 83. Gráficas de los errores cometidos.

5.3.8 Ejemplo 8

A efectos de poder validar los métodos utilizados para resolver la ecuación del transporte de contaminantes en el intervalo $[0,1]$ (km) correspondiente al estado estacionario

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (5.1)$$

en este ejemplo se trabajará con las condiciones iniciales

$$C(0) = 12, \quad C(1) = 8$$

(concentraciones en kg/m^3) y con D y u que vienen dadas por

$$D(x) = 12 + e^{-x}, \quad u(x) = 2 - \exp(-x)$$

en m^2/s y m/s respectivamente. La solución exacta es conocida:

$$C_e(x) = \frac{-637.8913746(12e^x \ln(12e^x + 1) + \ln(12e^x + 1) + 1)}{144 \cdot (12e^x + 1)} + 23.70296971$$

Las figuras 84 y 85 muestran las aproximaciones dadas por el método de los splines MD y el de las diferencias finitas ambos con 10 puntos equidistantes y los errores cometidos.

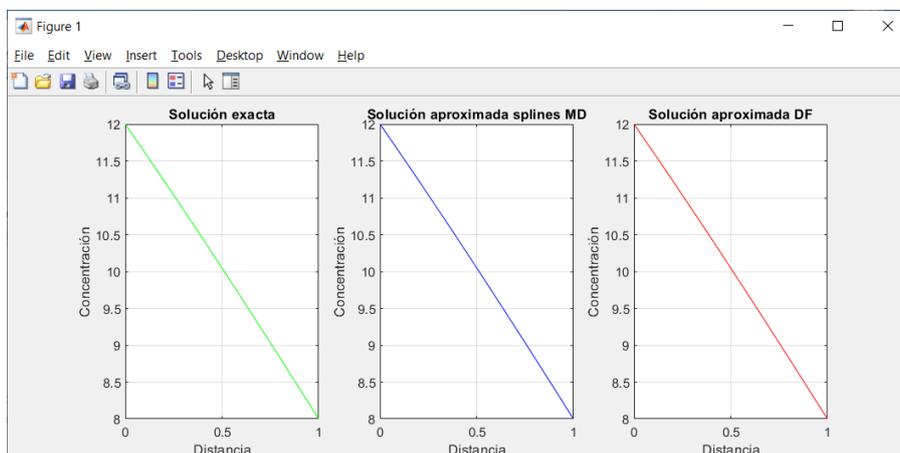


Figura 84. Gráficas de la concentración de contaminante exacta, aproximada por splines MD y aproximada por DF.

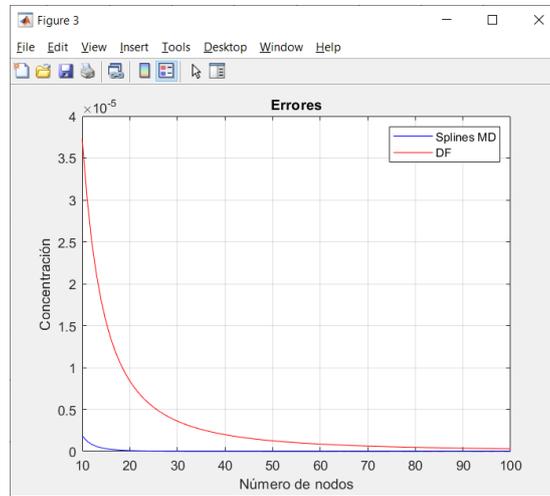


Figura 85. Gráficas de los errores cometidos.

6. CONCLUSIONES Y NUEVAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

6.1 Conclusiones

Los splines multidimensionales proporcionan un método robusto de interpolación y aproximación mínimo-cuadrática de datos. Igual que ocurre con los splines clásicos, heredan de ellos dos propiedades que los hacen muy interesantes para aplicarlos a ejemplos relacionados con el estudio de los contaminantes: se trata de funciones de clase infinitamente diferenciables, fáciles de manejar a la hora de evaluarlas en puntos, derivar, integrar, etc.

En los ejemplos vistos en los apartados 5.1 y 5.2 el software que se ha diseñado para la aplicación de la interpolación y aproximación mínimo-cuadrática muestra resultados muy satisfactorios y, en particular, cuando se aplica a ejemplos concretos donde los datos provienen de un campo escalar conocido, los errores son pequeños, incluso sin necesidad de contar con un mallado excesivamente fino. También se ha podido comprobar que los mallados no tienen por qué ser equiespaciados y que se puede trabajar con dominios que no tienen por qué ser rectangulares. Los tiempos de cálculo para mallados no excesivamente finos y dimensiones 2 y 3 son razonables. Si se consideran dimensiones superiores estos tiempos aumentan y sería necesario trabajar con ordenadores y estaciones de trabajo potentes. El principal inconveniente de la metodología que se ha presentado es que los datos de que se disponen tienen que corresponder a mallados obtenidos a partir de rectas paralelas en cada una de sus dimensiones. Es evidente que directamente el método no podría aplicarse al caso en los que hay que tener en cuenta la posición geográfica de las distintas estaciones de medición.

La aproximación por splines y mínimos cuadrados es útil cuando se disponen de un número muy elevado de datos y en el caso en que estos datos presenten pequeños errores y no sean completamente fiables. En este caso no es necesario que los datos provengan de un mallado regular.

En el caso de la utilización de la técnica de los splines multidimensionales para resolver las ecuaciones en derivadas parciales que modelizan la ecuación del transporte de contaminantes, los ejemplos mostrados en el apartado 5.3 de la memoria confirman que realizan una aproximación muy buena de la solución cuando está es conocida. A diferencia del método de las diferencias finitas usando mallados no muy grandes se obtienen muy buenos resultados y no dependen tanto de los tamaños de paso utilizados. Tienen muy buenas propiedades de estabilidad. Los tiempos de cálculo en el caso estacionario son muy pequeños. Si se trabaja con el caso no estacionario los tiempos de cálculo se alargan. Una de las ventajas de esta técnica es que, a la hora de trabajar con las distintas funciones que aparecen en la ecuación (3.4) (D , A , u y R) y las mismas condiciones iniciales, no es necesario conocerlas explícitamente, sino que basta con disponer de datos empíricos en los nodos con los que se está trabajando.

Respecto de las aplicaciones app designer desarrolladas, podemos destacar que, al poder trabajar con ficheros ejecutables, no es necesario disponer de la plataforma de computación y programación numérica Matlab. Se trata de aplicaciones interactivas, enfocadas sobre todo a la visualización, diseñadas de manera que el usuario no experto en programación las pueda utilizar fácilmente. Disponen de instrucciones de uso que están explicadas de forma didáctica para que se pueda hacer uso de la herramienta de inmediato. Un usuario con ciertos conocimientos de Matlab y que requiera trabajar con los datos numéricos obtenidos dispone de las distintas funciones implementadas.

Parte de este trabajo se ha publicado (Giménez et al A, 2017, Giménez et al B, 2017, Giménez et al, 2018).

6.2 Trabajo futuro

Respecto de los splines multidimensionales usados para la interpolación, en un futuro se desea el poder generalizar su uso al caso en que los datos de que se disponen provengan de puntos distribuidos irregularmente. En el caso de los splines bidimensionales, si se trata de puntos

$$\{X_r, Y_r, Z_r\}_{r=1}^N$$

una primera idea consistiría en trabajar con un mallado rectangular que contenga a dichos puntos y a partir de la expresión

$$S(x, y) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m z_{ij} V_i(x) W_j(y)$$

calcular los valores de z_{ij} de manera que

$$S(X_r, Y_r) = Z_r, r = 1, 2, \dots, N$$

e imponiendo algunas condiciones adicionales si fuera necesario.

Otra línea de investigación futura sería obtener los programas informáticos que implementen el método de los splines para resolver de manera aproximada la ecuación del transporte de contaminantes en dimensiones dos (2.2) y tres (2.1) y muchas otras que aparecen en la modelización de fenómenos relacionados con la contaminación. También podrían mejorarse los programas ya diseñados para que se pueda trabajar con condiciones de contorno distintas de las de Dirichlet y Neumann.

Otra idea interesante consiste en la obtención de versiones web de las apps designer diseñadas.

7. BIBLIOGRAFÍA

7.1 Referencias

- Aristodemou, E., Smith, D. V., Whitlow, C. D. (1992), *Theoretical and practical aspects of a hydrodynamic and water quality study of the tidal River Axe, Weston-S-Mare*. Proceedings of the Second International Conference on Hydraulic and environmental Modelling of Coastal, Estuarine and River Waters. Vol. 2. 242.
- Arya, S. P. *Air Pollution Meteorology and Dispersion*. Oxford University Press, 1999.
- Ascher, U. M., Greif, C. (2011), *A First Course in Numerical Methods*. SIAM. Jin Li and Andrew D Heap (2011), *A review of comparative studies of spatial interpolation methods in environmental sciences: performance and impact factors*. Ecological Informatics, 6(3):228–241.
- Aymerich, M., Navarrina, F., Casteleiro, M. (1985), *Interpolación mínimo-cuadrática de superficies a partir de datos irregularmente distribuidos*. Revista internacional de métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería. Vol. 1, 21-36.
- Bueno, J. L., Satre, H., LAVín, A. G. (1997), *Contaminación e ingeniería ambiental. Vol. I, II, III y IV*. FICYT, Oviedo.
- Chapra S. (1997), *Surface Water Quality Modeling*. McGraw Hill. International Editions.
- Claros, E. M., Cabello, J. J., Cirpiano, J. G. (2018), *Simulación de la dispersión de contaminantes del agua de la cuenca del Río Huaura*. Infinitum., vol. 8 (nº 1).
- Contreras, L. (2016), *Predicción e interpolación dinámica de los niveles de contaminación atmosférica mediante datos de intensidad de tráfico y dirección del viento*. Trabajo Fin de Máster. Máster Universitario de Gestión de la Información. Universitat Politècnica de València.
- De Boor, C., Ron, A. (1992), *Computational aspects of polynomial interpolation in several variables*. Math. Comp., 58, pp. 705-727
- Edzwald, J. K. (2011), *Water Quality and Treatment: A Handbook on Drinking Water*. American Water Works Association, American Society of Civil Engineers, Mcraw-Hill
- ENVIRA, Legislación ambiental y estructura legislativa en España | Envira Ingenieros Asesores. <https://envira.es/es/legislacion-ambiental-y-estructura-legislativa-en-espana/> [Consulta: 22 de agosto 2021]
- Franco, A. (2018), *Diseño y programación de un software para prevenir el riesgo de contaminación de una población por gases contaminantes*. Trabajo Fin de Máster. Universidad Pontificia Comillas de Madrid.
- Gallego, A. (2012) *Contaminación atmosférica*. [Recurso electrónico] e-libro, Corp. Madrid: Universidad Nacional de Educación a Distancia. <https://elibro.net/es/ereader/upv/48595>
- García, A. (2004), *Desarrollo de un modelo tridimensional para la determinación del transporte de sustancias en estuarios y zonas someras*. Tesis Doctoral. Universidad de Cantabria, Santander.
- Green, P.J., Silverman, B.W. (1994) *Nonparametric Regression and Generalized Linear Models*. London. Chapman & Hall.

- Giménez, F., Marín, M. J., Monsoriu, J. A. (2014a), *Una aplicación de Matlab para el estudio del método de interpolación del inverso de la distancia multidimensional*. XXII CUIEET.
- Giménez, F., Cuador, J. Q., Monsoriu, J. A. (2014), *Un laboratorio virtual para la enseñanza del Krigeado*. MSEL, Vol. 7. 73-82.
- Giménez, J. F., Fernández de Córdoba, P., Giménez, F., Monsoriu, J. A. (2017), *A teaching application for the study of least squares approximation using cubic splines*. 11 th International Technology, Education and Development Conference (INTED 2017), Valencia.
- Giménez, J. F., Giménez, F., Fernández de Córdoba, P., Monsoriu, J. A. (2017), *Una aplicación docente para el estudio de los splines bidimensionales*. XXVI Congreso de Innovación Educativa en las Enseñanzas Técnicas (CUIEET), Badajoz.
- Giménez, F., Giménez, J. F., Fernández de Córdoba, P., Monsoriu, J. A. (2018), *Using cubic splines to solve second linear differential equations: a teaching application*. 12 th International Technology, Education and Development Conference (INTED 2018), Valencia.
- Habermann, C., Kindermann, F. (2007), *Multidimensional Spline Interpolation: Theory and Applications*. *Computational Economics*. Vol. 30, Issue 2, 153–169.
- Hernández, G. M., León, E. M. (2016), *Métodos de interpolación multivariable*. Bachelor thesis, Universidad de El Salvador.
- Kalyani, P., Rama, P. S. (2013), *Solution of Boundary Value Problems by Approaching Spline Techniques*. *International Journal of Engineering Mathematics*. Vol. 2013, Article ID 482050, 9 pages.
- Kleinschmith D. G., Pearce, B.R. (1992), *A microcomputer-based tool for the investigation of coastal hydrodynamic systems*. *Proceedings of the Second International Conference on Hydraulic and environmental Modelling of Coastal, Estuarine and River Waters*. Vol. 2. 493.
- LIGHTPOLLUTIONMAP, Mapa mundial interactivo de la contaminación numérica. <https://www.lightpollutionmap.info> [Consulta: 22 de agosto 2021]
- Londo, L. A. (2012), *Geoestadística Aplicada*. EAE Editorial Academia Española
- López Jiménez, PA. (2016). Las partes de un modelo matemático de dispersión de contaminantes en medios receptores. RIUNET. Universitat Politècnica de València. <http://hdl.handle.net/10251/66671>
- MAMBIENTE, Portal web de la calidad del aire del ayuntamiento de Madrid. <http://www.mambiente.madrid.es> [Consulta: 22 de agosto 2021]
- Maron, D. E., Gutierrez, A. (2013), *Resolución de la ecuación de la advección-dispersión en una dimensión, usando funciones splines*. *Tecnología y Ciencias del Agua*, vol. IV, núm. 4, pp. 173-178.
- MATHWORKS, Desarrollar apps mediante App Designer. <https://es.mathworks.com/help/matlab/app-designer.html> [Consulta: 22 de agosto 2021]
- Merkel, B. J., Planer-Friedrich, B. (2008), *Groundwater Geochemistry A Practical Guide to Modeling of Natural and Contaminated Aquatic Systems*. Springer, 230 pp.

- MITECO A. Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico. <https://www.miteco.gob.es/es/> [Consulta: 22 de agosto 2021]
- MITECO B, Evaluación de la calidad del aire en España 2016. https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/atmosfera-y-calidad-del-aire/informeevaluacioncalidadaireespana2016_tcm30-431898.pdf [Consulta: 22 de agosto 2021]
- Navas, J. L. (2015), *Medida y evaluación de la contaminación lumínica en entornos urbanos*. Tesis doctoral. Universidad de Málaga.
- Ogata, A., R. B., Banks; A. (1961), *Solution of the Differential Equation of longitudinal Dispersion in Porous Media*. United States Government Printing Office. Paper 411 – A.
- Olea, R. A. (1999), *Geostatistics for Engineers and Earth Scientists*. Kluwer Academic Publishers.
- Paya, A., Gutierrez, F. J. (2001), *Contaminación atmosférica, ruidos y radiaciones*. Editex.
- Sámano, M. L. (2011), *Desarrollo e integración de modelos numéricos de calidad del agua en un Sistema de Información Geográfica*. Tesis doctoral. Departamento de Ciencias y Técnicas del Agua y del Medio Ambiente. Universidad de Cantabria.
- Sánchez, L. (2009), *Modelación de efectos anómalos del transporte de masa en tanque de laboratorio: Análisis comparativo de la aplicación de distintas metodologías*. Tesis de Máster, Universitat Politècnica de València. <https://riunet.upv.es/handle/10251/11271>
- Seoánez, M. (2002), *Tratado de la contaminación atmosférica: problemas, tratamiento y gestión*. Madrid: Mundi-Prensa. <https://elibro.net/es/ereader/upv/35868>
- Srivastava, P. K. (2014). *Study of differential equations with their polynomial and nonpolynomial spline based approximation*. Acta Tehnica Corviniensis, Bulletin of Engineering Tome VII Fascicule 3 [July – September]
- Szymkiewicz, R. (1993), *Solution of the advection-diffusion equation using the spline function and finite elements*. Communications in Numerical Methods in Engineering. Vol.9, pp. 197-206.
- Wu, Y., Falconer, R. A. (2000). *A mass conservative 3D numerical model for predicting solutes fluxes in estuarine waters*. Advances in Water. Resources. 2000. 531-543.
- Zorsahín, M., Dag, I. Dogan, S., Irk, D. (2018), *A numerical solution of the advección-difusión equation by using extended cubic B-spline functions*. Anadolu University Journal of Science and Technology A- Applied Sciences and Engineering, Volume 19, Issue 2, 347 – 355.

PRESUPUESTO

8. PRESUPUESTO DEL PROYECTO

En lo que sigue se presenta de forma detallada el presupuesto del proyecto con el objetivo de valorar la viabilidad económica del proyecto. Hay que tener en cuenta que en buena medida se trata de un proyecto de ingeniería eminentemente académico más que industrial, que conlleva unos costes asociados. El objetivo de este trabajo es realizar un software para la utilización de los splines multidimensionales en el tratamiento y manejo de datos utilizados en el estudio de la contaminación ambiental y en la resolución aproximada de la ecuación en derivadas parciales que modeliza del transporte de contaminantes, por lo que es necesario presentar una valoración del presupuesto necesario para elaborar dicho software.

En la redacción de este presupuesto se ha tenido en consideración las “*Recomendaciones en la Elaboración de Presupuestos en Actividades de I+D+I*” (revisión de 2018) de la UPV de acuerdo con el artículo 83 de la Ley Orgánica de Universidades. Se considera que el trabajo del autor del TFM, Graduado en Ingeniería Mecánica, tiene un coste de 20€/h. Por otro lado, los tutores, considerados como Ingenieros Industriales, se asume que cobran una tarifa de 30€/h.

El autor ha utilizado para el proyecto un portátil MSI modelo GF65 Thin10SER adquirido recientemente y que tiene un precio de 1299€. Se trata de un Ordenador portátil de 15.6" FHD 144Hz, 1920 x 1080 pixeles, (1080p Full HD), procesador Intel Core i7-10750H, 16GB RAM, 512GB SSD y tarjeta gráfica RTX2060 (GDDR6 6GB). Se han utilizado también folios, bolígrafos y una memoria USB de 16GB. Además, se ha hecho uso de los programas comerciales Windows 10, Microsoft Office, Acrobat Profesional y Matlab. Se supone que el periodo de amortización del ordenador y de las licencias es de 6 años. Contando con los 251 días laborables del año 2021 y con una jornada laboral de 8 horas el coste relativo por hora de uso de cada uno de ellos puede calcularse con la fórmula:

$$\text{Coste (€)} = \frac{\text{coste del concepto (€)}}{6 \times 251 \times 8}$$

La tabla 12 muestra los precios por cada hora de uso de la maquinaria y software y la 13 los precios básicos.

Tabla 12. Costes por hora de maquinaria y software

Concepto	Periodo de amortización (años)	Coste total (€)	Coste (€/h)
Portátil MSI modelo GF65 Thin10SER	6	1299	0,0996
Licencia Windows 10 Pro	6	259	0,0215
Licencia Microsoft Office 365	6	85	0,00705
Licencia Acrobat Profesional	6	95	0,00789
Licencia Matlab	6	2000	0,166

El trabajo realizado en el proyecto contempla un estudio teórico previo y su realización propiamente dicha (programación en Matlab de las funciones y aplicaciones desarrolladas que implementan los métodos y redacción de la memoria). La duración aproximada del proyecto ha sido de unas 280 horas, estimándose que se han dedicado unas 60 horas al estudio teórico previo, 120 a la programación y 100 a la redacción de la memoria. Se cuenta con que hay un 3% de gastos directos complementarios, para tener en cuenta posibles gastos auxiliares en la luz o la conexión a Internet. La tabla 14 muestra el cuadro de presupuestos parciales.

Tabla 13. Cuadro de precios básicos

Código	Descripción	Unidad	Precio €/h	Precio €
Q1	Ingeniero Mecánico	h	20	
Q2	Ingeniero Industrial	h	30	
H1	Portátil MSI modelo GF65 Thin10SER	h	0,0996	
S1	Licencia Windows 10 Pro	h	0,0215	
S2	Licencia Microsoft Office 365	h	0,00705	
S3	Licencia Acrobat Profesional	h	0,00789	
S4	Licencia Matlab	h	0,166	
M1	Folios	ud		0,01
M2	Bolígrafo	ud		1
M3	Memoria USB	ud		8

Tabla 14. Cuadro de presupuestos parciales.

Código	Descripción	Unidades	Precio €
Estudio previo (60 h)			
Q1	Ingeniero Mecánico	60	1200
Q2	Ingeniero Industrial	60	1800
H1	Portátil MSI modelo GF65 Thin10SER	60	5,8
S1	Licencia Windows 10 Pro	60	0,13
CDC	Costes directos complementarios		90
<i>Coste total</i>			3096
Programación en Matlab (120h)			
Q1	Ingeniero Mecánico	120	2400
Q2	Ingeniero Industrial	120	3600
H1	Portátil MSI modelo GF65 Thin10SER	120	11,6
S1	Licencia Windows 10 Pro	120	0,26
S4	Licencia Matlab	120	20
CDC	Costes directos complementarios		181
<i>Coste total</i>			6213
Redacción de la memoria (100h)			
Q1	Ingeniero Mecánico	100	2000
H1	Portátil MSI modelo GF65 Thin10SER	100	9,96
S1	Licencia Windows 10 Pro	100	2,15
S3	Licencia Acrobat Profesional	100	0,7
S4	Licencia Matlab	100	16,6
CDC	Costes directos complementarios		61
<i>Coste total</i>			2090
Gastos en material fungible			
M1	Folios	500	5
M2	Bolígrafo	4	4
M3	Memoria USB	1	8
<i>Coste total</i>			17

Finalmente, sumando los presupuestos parciales se alcanza la cantidad de 11416 € que constituye el Presupuesto de Ejecución Material (PEM), al que hay que añadir un 13% de gastos generales (1484 €) y un 6% de beneficio industrial (685 €). Así el presupuesto de ejecución por contrata asciende a 13585 €. Con el IVA del 21% se obtiene que el PRESUPUESTO TOTAL es de:

DIECISEIS MIL CUATROCIENTOS TREINTA Y OCHO EUROS (16438 €).

APÉNDICE

9. CÓDIGOS DE LAS FUNCIONES DE MATLAB

9.1 Funciones para splines bidimensionales

- **Z = spline2Dk(x,y,z,X,Y)**

```
%
% Calcula el spline cúbico knot a knot y lo evalúa en los puntos
% (X_i,Y_i) obtenidos a partir de los vectores X e Y
% x: Vector que recoge las abcisas de los puntos a interpolar
% y: Vector que recoge las ordenadas de los puntos a interpolar
% z: Vector que recoge los valores del campo
%     escalar a aproximar en x e y
% Z: Vector que recoge los valores del campo
%     escalar a aproximar en X e Y
%
function Z = spline2Dk(x,y,z,X,Y)
    n = numel(X);
    m = numel(Y);
    Z = zeros(n,m);
    Bx = Bk_aux(x,X);
    By = Bk_aux(y,Y);
    parfor i=1:n
        for j=1:m
            x_ = X(i);
            y_ = Y(j);
            zz = 0;
            for ii = 1:numel(x)
                for jj = 1:numel(y)
                    zz = zz+z(ii,jj)*Bx(ii,i)*By(jj,j);
                end
            end
            Z(i,j) = zz;
        end
    end

% Calculo de y_ = V_i(x_) (spline knot a knot)
function y_ = bk_aux(i,x,x_)
    y = zeros(numel(x),1);
    y(i) = 1;
    y_ = spline(x,y,x_);
end

% Calculo de B = V_i(X) (spline knot a knot)
function B = Bk_aux(x,X)
    B = zeros(numel(x),numel(X));
    for i=1:numel(x)
        B(i,:) = bk_aux(i,x,X);
    end
end
end
```

NOTA: Para splines naturales y completos se tienen las funciones

- **Z = spline2Dn(x,y,z,X,Y)**
- **Z = spline2Dc(alfa1,alfa2,beta1,beta2,x1,y1,z,X,Y)**.

```
• [Y,P] = splinenatural(x,y,X)
%
% Calcula el valor del spline natural que pasa por los puntos
% (x_i,y_i) en X donde x = (x_i) e y = (y_i)
% X es un vector de valores Xi en donde se desea evaluar el spline
% Y es un vector con los valores del spline en los puntos Xi
% P matriz cuya fila recoge los coeficientes de los polinomios
% que definen el spline
%
function [Y,P] = splinenatural(x,y,X)
    n = length(x);
    h = zeros(n-1,1);
    for j = 1:n-1
        h(j) = x(j+1) - x(j);
    end
    A = zeros(n);
    A(1,1) = 1;
    A(n,n) = 1;
    for i = 2:n-1
        A(i,i-1) = h(i-1);
        A(i,i) = 2*(h(i-1)+h(i));
        A(i,i+1) = h(i);
    end
    b = zeros(n,1);
    for i = 2:n-1
        b(i) = (3/h(i))*(y(i+1)-y(i)) - (3/h(i-1))*(y(i)-y(i-1));
    end
    cj = A\b;
    bj = zeros(n-1,1);
    for i = 1:n-1
        bj(i) = (1/h(i))*(y(i+1)-y(i)) - (1/3*h(i))*(2*cj(i)+cj(i+1));
    end
    dj = zeros(n-1,1);
    for i = 1:n-1
        dj(i) = (1/(3*h(i)))*(cj(i+1)-cj(i));
    end
    P = zeros(n-1,4);
    for i = 1:n-1
        P(i,1) = dj(i);
        P(i,2) = cj(i);
        P(i,3) = bj(i);
        P(i,4) = y(i);
    end
    m = numel(X);
    Y = 0*X;
    for i=1:m
        for j=1:n-1
            if (X(i)>=x(j)) && (X(i)<=x(j+1))
                Y(i) = polyval(P(j,:),X(i)-x(j));
            end
        end
    end
end
```

9.2 Funciones para splines tridimensionales

```
• [w,wf] = splines3DT(F,x1,y1,z1,X,Y,Z)
%
% Calcula el valor de w = S(X_i,Y_j,T_k) (arreglo multidimensional)
% siendo S el spline knot a knot
% 3-dimensional que pasa por los puntos (x1_i,y1_j,t1_k)
```

```

% tomando el valor F(x1_i,y1_j,t1_k)
% siendo F la expresión en las variables x, y, t de un
% campo escalar 3-dimensional
% y wf = f(X_i,Y_j,T_k)
%
function [w,wf] = splines3DT(F,x1,y1,t1,X,Y,T)
    nx = numel(x1);
    ny = numel(y1);
    nt = numel(t1);
    f = @(x,y,t)eval(F);
    z = zeros(nx,ny,nt);
    for i=1:nx
        for j=1:ny
            for k=1:nt
                z(i,j,k) = f(x1(i),y1(j),t1(k));
            end
        end
    end
    end
    nX = numel(X);
    nY = numel(Y);
    nT = numel(T);
    w = zeros(nX,nY,nT);
    wf = w;
    Bx = Bk_aux(x1,X);
    By = Bk_aux(y1,Y);
    Bt = Bk_aux(t1,T);
    parfor i=1:nX
        for j=1:nY
            for k=1:nT
                x_ = X(i);
                y_ = Y(j);
                z_ = T(k);
                zz = 0;
                wf(i,j,k) = f(X(i),Y(j),T(k));
                for ii = 1:nx
                    for jj = 1:ny
                        for kk = 1:nt
                            zz = zz+z(ii,jj,kk)*Bx(ii,i)*By(jj,j)*Bt(kk,k);
                        end
                    end
                end
                w(i,j,k) = zz;
            end
        end
    end
end
end

% Calculo de y_ = V_i(x_) (spline knot a knot)
function y_ = bk_aux(i,x,x_)
    y = zeros(numel(x),1);
    y(i) = 1;
    y_ = spline(x,y,x_);
end

% Calculo de B = V_i(X) (spline knot a knot)
function B = Bk_aux(x,X)
    B = zeros(numel(x),numel(X));
    for i=1:numel(x)
        B(i,:) = bk_aux(i,x,X);
    end
end
end
end

```

NOTA: Para splines 3D trabajando con matrices se tiene a

- `w = splines3DTM(x1,y1,z1,v,X,Y,Z)` .

9.3 Funciones para splines mínimo-cuadráticos

- `[X,Z,Z1,Ze,u] = mcsplif_aux(f,x,A,x_,a,b,tipo)`

```

%
% Calcula el spline cúbico de mínimos cuadrados
% y el polinomio de mínimos cuadrados que aproxima
% a la función dada por la expresión f a partir de los nodos w = (w_i)
% (abcisas)
% trabajando con los valores x_ = (x_j)
% tipo: 1 spline knot a knot
%       2 spline natural
%       3 spline completo
% A: amplitud. Si A = [] o A = 0 se consideran
%     los puntos (w_i,f(w_i)) y si
%     A>0 e consideran los puntos (w_i,f(w_i)+-A+2*A*rand)
%     (se modifican aleatoriamente los valores f(x_i)
% a y b son los valores de la derivada en los extremos
%     si se elige el spline completo
% X vector de abcisas utilizado para calcular las aproximaciones
% Z valor del spline de mínimos cuadrados en X
% Z1 valor del polinomio de mínimos cuadrados en X
% Ze = f(X)
% u = [w f(w)]
%
function [X,Z,Z1,Ze,u] = mcsplif_aux(f,w,A,x_,a,b,tipo)
    if size(w,1)==1
        x = w';
    else
        x = w;
    end
    y = eval(f);
    if numel(A)>0
        if A>0
            y = y-A+2*A*rand(numel(x),1);
        end
    end
    u = [x y];
    X = linspace(u(1,1),u(size(u,1),1),500);
    x = X;
    Ze = eval(f);
    if numel(x_)==0;
        if tipo==1
            Z = spline(u(:,1),u(:,2),X);
        end
        if tipo==2
            Z = splinenatural(u(:,1),u(:,2),X);
        end
        if tipo==3
            Z = spline(u(:,1),[a;u(:,2);b],X);
        end
        p = polyfit(u(:,1),u(:,2),numel(u(:,1))-1);
        Z1 = polyval(p,X);
    else
        if tipo==1
            Z = mcspline2Dk(u,x_,X);
        end
        if tipo==2
            Z = mcspline2Dn(u,x_,X);
        end
    end
end

```

```

end
if tipo==3
    Z = mcspline2Dc(u,a,b,x_,X);
end
p = polyfit(u(:,1),u(:,2),numel(x_)-1);
Z1 = polyval(p,X);
end
end

```

NOTA: Para matrices se tiene a $[X,Z,Z1] = \text{mcsplid_aux}(u,x_,a,b,tipo)$.

```

•  $[X1,Y1,Z1,Ze,z_,Z] = \text{bmcsplif\_aux}(f,X,Y,A,x_,y_)$ 
%
% Calcula el spline cúbico bidimensional de mínimos
% cuadrados que aproxima
% a la función dada por la expresión f (con variables x e y)
% a partir de los nodos X = (X_i) e Y = (Y_j)
% trabajando con los valores x_ = (x_i) e y_ = (y_j)
% A: amplitud. Si A = [] o A = 0 se consideran los puntos %
% (X_i,Y_j,f(X_i,Y_j)) y si
% A>0 se consideran los puntos ((X_i,Y_j,f(X_i,Y_j)-A+2*A*rand) % (se modifican
% aleatoriamente los valores f(X_i,Y_j)
% X1, Y1 vectores utilizados para las aproximaciones
% Z1 valor del spline bidimensional de mínimos cuadrados en X1 e Y1
% z_ recoge los valores z_{ij} usados por el spline bidimensional
% Ze valores exactos de la función en los puntos (X_i,Y_j)
% Z valores de f en (X_i,Y_j) modificados aleatoriamente
%
function [X1,Y1,Z1,Ze,z_,Z] = bmcsplif_aux(f,X,Y,A,x_,y_)
    f_ = @(x,y)eval(f);
    Z = zeros(numel(X),numel(Y));
    for i=1:numel(X)
        for j=1:numel(Y)
            Z(i,j) = f_(X(i),Y(j));
        end
    end
    end
    if numel(A)>0
        if A>0
            ran = randn(numel(X),numel(Y));
            Z = Z-A+2*A*ran/max(max(ran));
        end
    end
    end
    X1 = linspace(X(1),X(numel(X)),300);
    Y1 = linspace(Y(1),Y(numel(Y)),300);
    Ze = zeros(300,300);
    for i=1:numel(X1)
        for j=1:numel(Y1)
            Ze(i,j) = f_(X1(i),Y1(j));
        end
    end
    end
    [Z1,z_] = mcspline3D(X,Y,Z,x_,y_,X1,Y1);
end

```

NOTA: Para matrices se tiene a

- $[X1,Y1,Z1,z_] = \text{bmcsplim_aux}(X,Y,Z,x_,y_)$.

9.4 Funciones para resolución por splines multidimensionales de mínimos cuadrados de la ecuación del transporte de contaminantes

```

• u = transportel_aux(alfa,beta,C0,R,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx)

%
% Aplica el método de splines bidimensionales y mínimos cuadrados
% a la ecuación del transporte
% para (t,x) perteneciente a [0,T]x[0,L]
% tt es un vector ordenado con nodos en [0,T] (incluyendo a 0 y T)
% xx es un vector ordenado con nodos en [0,L] (incluyendo a 0 y L)
% A_ expresión correspondiente a A(t,x)
% dtA_ expresión correspondiente a (d/dt)A(t,x)
% dxA_ expresión correspondiente a (d/dx)A(t,x)
% U_ expresión correspondiente a U(t,x)
% dxU_ expresión correspondiente a (d/dx)U(t,x)
% D_ expresión correspondiente a D(t,x)
% dxD_ expresión correspondiente a (d/dx)D(t,x)
% R_ expresión correspondiente a R(t,x)
% con condiciones de Dirichlet:
% C0_ expresión que recoge a C(0,x) (conocido)
% alfa_ expresión que recoge a C(t,0) (conocido)
% beta_ expresión que recoge a C(t,L) (conocido)
% u matriz que recoge a los valores u_{ij} que aproximan
% a C(tt_i,xx_j)
%
function u = transportel_aux(alfa_,beta_,C0_,R_,A_,dtA_,dxA_...
...U_,dxU_,D_,dxD_,tt,xx)
    alfa = @(t)eval(alfa_);
    beta = @(t)eval(beta_);
    C0 = @(x)eval(C0_);
    R = @(t,x)eval(R_);
    A = @(t,x)eval(A_);
    dtA = @(t,x)eval(dtA_);
    dxA = @(t,x)eval(dxA_);
    U = @(t,x)eval(U_);
    dxU = @(t,x)eval(dxU_);
    D = @(t,x)eval(D_);
    dxD = @(t,x)eval(dxD_);
    n = numel(tt);
    m = numel(xx);
    AA = eye(n*m);
    bb = zeros(n*m,1);
    for r=1:n*m
        r
        [I,J] = indices(r,n); %
        if I==1
            bb(r) = C0(xx(J));
        else
            if J==1
                bb(r) = alfa(tt(I));
            end
            if J==m
                bb(r) = beta(tt(I));
            end
            if (J>1)&&(J<m)
                bb(r) = beta_aux(alfa,beta,R,C0,A,dtA,dxA,...
                ...U,dxU,D,dxD,tt,xx,I,J);
                parfor s=1:n*m
                    [i,j] = indices(s,n);
                end
            end
        end
    end
end

```

```

        if i==1
        else
            if (j>1) && (j<m)
                AA(r,s) = alfa_aux(A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,...
...tt,xx,i,j,I,J);
            end
        end
    end
end
end
end
z = AA\b;
u = zeros(n,m);
for r=1:n*m
    [i,j] = indices(r,n);
    u(i,j) = z(r);
end
end

```

• **y = beta_aux(alfa,beta,R,C0,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx,I,J)**

```

%
% Calcula la entrada r-ésima (donde r es la posición de C_{IJ})
% del vector columna de terminos independientes
% del sistema de ecuaciones lineales que se obtiene al aplicar el
% splines bidimensionales a la ecuación del transporte
% para (t,x) perteneciente a [0,T]x[0,L]
% tt es un vector ordenado con nodos en [0,T] (incluyendo a 0 y T)
% xx es un vector ordenado con nodos en [0,L] (incluyendo a 0 y L)
% A_ función correspondiente a A(t,x)
% dtA_ función correspondiente a (d/dt)A(t,x)
% dxA_ función correspondiente a (d/dx)A(t,x)
% U_ función correspondiente a U(t,x)
% dxU_ función correspondiente a (d/dx)U(t,x)
% D_ función correspondiente a D(t,x)
% dxD_ función correspondiente a (d/dx)D(t,x)
% R_ función correspondiente a (d/dt)A(t,x)
% con condiciones de Dirichlet:
% C0_ función que recoge a C(0,x) (conocido)
% alfa_ función que recoge a C(t,0) (conocido)
% beta_ función que recoge a C(t,L) (conocido)
%
function y = beta_aux(alfa,beta,R,C0,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx,I,J)
    I1 = fun_1(R,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx,I,J);
    I2 = 0;
    m = numel(xx);
    for j=1:m
        I2 = I2 + fun_2(C0,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx,j,I,J);
    end
    I3 = 0;
    I4 = 0;
    n = numel(tt);
    for i=2:n
        I3 = I3 + fun_3(alfa,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx,i,I,J);
        I4 = I4 + fun_4(beta,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx,i,I,J);
    end
    y = -I1-I2-I3-I4;
end

```

• **y = alfa_aux(A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx,i,j,I,J)**

```

%
% Calcula la entrada (r,s) (donde r es la posición de C_{IJ} y
% s es la posición de C_{ij}) de la matriz de coeficientes
% del sistema de ecuaciones lineales que se obtiene al aplicar el
% splines bidimensionales a la ecuación del transporte
% para (t,x) perteneciente a [0,T]x[0,L]

```

```

% tt es un vector ordenado con nodos en [0,T] (incluyendo a 0 y T)
% xx es un vector ordenado con nodos en [0,L] (incluyendo a 0 y L)
% A_ función correspondiente a A(t,x)
% dtA_ función correspondiente a (d/dt)A(t,x)
% dxA_ función correspondiente a (d/dx)A(t,x)
% U_ función correspondiente a U(t,x)
% dxU_ función correspondiente a (d/dx)U(t,x)
% D_ función correspondiente a D(t,x)
% dxD_ función correspondiente a (d/dx)D(t,x)
% R_ función correspondiente a (d/dt)A(t,x)
% con condiciones de Dirichlet:
% C0_ función que recoge a C(0,x) (conocido)
% alfa_ función que recoge a C(t,0) (conocido)
% beta_ función que recoge a C(t,L) (conocido)
%
function y = alfa_aux(A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx,i,j,I,J)
y = fun_5(A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx,i,j,I,J);
end

```

NOTA: Para condiciones de Neumann se tiene a

- **u = transporte2_aux(alfa,beta,C0,R,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx) .**

y para trabajar con matrices a

- **u = transporte3_aux(alfa,beta,C0,R,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx)**
u = transporte4_aux(alfa,beta,C0,R,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx)

- **C = metDF(alfa,beta,C0,R,A,dtA,dxA,U,dxU,D,dxD,tt,xx)**

```

%
% Aplica el método de las diferencias finitas a la ecuación del
% transporte para (t,x) perteneciente a [0,T]x[0,L]
% tt es un vector ordenado con nodos equiespaciados en [0,T]
% (incluyendo a 0 y T)
% xx es un vector ordenado con nodos equiespaciados en [0,L]
% (incluyendo a 0 y L)
% A_ expresión correspondiente a A(t,x)
% dtA_ expresión correspondiente a (d/dt)A(t,x)
% dxA_ expresión correspondiente a (d/dx)A(t,x)
% U_ expresión correspondiente a U(t,x)
% dxU_ expresión correspondiente a (d/dx)U(t,x)
% D_ expresión correspondiente a D(t,x)
% dxD_ expresión correspondiente a (d/dx)D(t,x)
% R_ expresión correspondiente a (d/dt)A(t,x)
% con condiciones de Dirichlet:
% C0_ expresión que recoge a C(0,x) (conocido)
% alfa_ expresión que recoge a C(t,0) (conocido)
% beta_ expresión que recoge a C(t,L) (conocido)
% C matriz que recoge a los valores C_{ij} que aproximan a
% C(tt_i,xx_j)
%
function C = metDF(alfa_,beta_,C0_,R_,A_,dtA_,dxA_,U_,dxU_,D_,dxD_,tt,xx)
alfa = @(t)eval(alfa_);
beta = @(t)eval(beta_);
C0 = @(x)eval(C0_);
R = @(t,x)eval(R_);
A = @(t,x)eval(A_);
dtA = @(t,x)eval(dtA_);
dxA = @(t,x)eval(dxA_);
U = @(t,x)eval(U_);

```

```

dxU = @(t,x)eval(dxU_);
D = @(t,x)eval(D_);
dxD = @(t,x)eval(dxD_);
h = xx(2)-xx(1);
k = tt(2)-tt(1);
n = numel(tt);
m = numel(xx);
C = zeros(n,m);
for j=1:m
    C(1,j) = C0(xx(j));
end
for i=1:n
    C(i,1) = alfa(tt(i));
    C(i,m) = beta(tt(i));
end
for i=1:n-1
    for j=2:m-1
        y1 = D(tt(i),xx(j))*A(tt(i),xx(j))*(C(i,j+1)-2*C(i,j)+C(i,j-1))/h^2;
        y2 = (dxD(tt(i),xx(j))*A(tt(i),xx(j))+D(tt(i),xx(j))*dxA(tt(i),xx(j))-
        U(tt(i),xx(j))*A(tt(i),xx(j)))*(C(i,j+1)-C(i,j-1))/(2*h);
        y3 =
        (dtA(tt(i),xx(j))+dxU(tt(i),xx(j))*A(tt(i),xx(j))+U(tt(i),xx(j))*dxA(tt(i),xx(j))
        )*C(i,j);
        y4 = R(tt(i),xx(j));
        C(i+1,j) = C(i,j)+k/A(tt(i),xx(j))*(y1+y2-y3+y4);
    end
end
end
end

```

9.5 Funciones para resolución por splines de mínimos cuadrados de PVI's de 2º orden

- **[X,Z] = spedo(A,B,C,D,a,alfa,b,beta,x)**

```

%
% Aplica el método de los splines cúbicos al PVI con las condiciones de Dirichlet en
% un intervalo dado [a,b]
% A función en la variable x que recoge a A(x)
% B función en la variable x que recoge a B(x)
% C función en la variable x que recoge a C(x)
% D función en la variable x que recoge a D(x)
% a extremo izquierda del intervalo
% Alfa valor de y(a)
% b extremo derecha del intervalo
% beta valor de y(b)
% X es un vector ordenado con nodos x_i en [a,b] usados para evaluar
% el spline
% Z es un vector ordenado con los valores del spline en los nodos x_i
%
function [X,Z] = spedo(A,B,C,D,a,alfa,b,beta,x)
    if size(x,1)==1
        x = x';
    end
    X = linspace(a,b,400)';
    plot(X,D(X))
    pause
    Z = 0*X;
    n = numel(x)-1;
    M = zeros(n-1);
    N = zeros(n-1,1);
    for i=1:n-1

```

```

        [wi,dwi,ddwi] = b_aux(i+1,x,X);
    for j=1:n-1
        [wj,dwj,ddwj] = b_aux(j+1,x,X);
        Wi = A(X).*ddwi+B(X).*dwi+C(X).*wi;
        Wj = A(X).*ddwj+B(X).*dwj+C(X).*wj;
        M(i,j) = int_simpson_pt(X,Wi.*Wj);
    end
end
[w0,dw0,ddw0] = b_aux(1,x,X);
[wn,dwn,ddwn] = b_aux(n+1,x,X);
W0 = A(X).*ddw0+B(X).*dw0+C(X).*w0;
Wn = A(X).*ddwn+B(X).*dwn+C(X).*wn;
for i=1:n-1
    [wi,dwi,ddwi] = b_aux(i+1,x,X);
    Wi = A(X).*ddwi+B(X).*dwi+C(X).*wi;
    N(i) = -alfa*int_simpson_pt(X,W0.*Wi)-...
...beta*int_simpson_pt(X,Wn.*Wi)-... ..int_simpson_pt(X,D(X).*Wi);
end
y_ = [alfa;M\N;beta];
u = [x,y_];
Z = spline2D(u,X);
end

function [y_,dy_,ddy_] = b_aux(I,a,b,x,x_)
if nargin==3
    x = a;
    x_ = b;
    y = zeros(numel(x),1)';
    y(I) = 1;
    y_ = spline(x,y,x_);
    dy_ = 0*y_;
    ddy_ = 0*y_;
    PP = spline(x,y);
    [BREAKS,C,L,K,D] = unmkpp(PP);
    dC = zeros(L,3);
    ddC = zeros(L,2);
    for i=1:L
        dC(i,:) = polyder(C(i,:));
        ddC(i,:) = polyder(polyder(C(i,:)));
    end
    for i=1:numel(x_)
        for j=1:numel(BREAKS)-1
            if (x_(i)>=BREAKS(j)) && (x_(i)<BREAKS(j+1))
                dy_(i) = polyval(dC(j,:),x_(i)-BREAKS(j));
                ddy_(i) = polyval(ddC(j,:),x_(i)-BREAKS(j));
            end
        end
        if x_(i)==BREAKS(numel(BREAKS))
            dy_(i) = polyval(dC(j,:),x_(i)-BREAKS(numel(BREAKS)-1));
            ddy_(i) = polyval(ddC(j,:),x_(i)-BREAKS(numel(BREAKS)-1));
        end
    end
else
    y = zeros(numel(x),1);
    y(I) = 1;
    y = [a;y;b];
    y_ = spline(x,y,x_);
    dy_ = 0*y_;
    ddy_ = 0*y_;
    PP = spline(x,y);
    [BREAKS,C,L,K,D] = unmkpp(PP);
    dC = zeros(L,3);
    ddC = zeros(L,2);
    for i=1:L
        dC(i,:) = polyder(C(i,:));

```

```

        ddC(i,:) = polyder(polyder(C(i,:)));
    end
    for i=1:numel(x_)
        for j=1:numel(BREAKS)-1
            if (x_(i)>=BREAKS(j)) && (x_(i)<=BREAKS(j+1))
                dy_(i) = polyval(dC(j,:),x_(i)-BREAKS(j));
                ddy_(i) = polyval(ddC(j,:),x_(i)-BREAKS(j));
            end
        end
    end
end
end
end

```

NOTA: Para condiciones de Neumann

- **[X,Z] = spedoN(A,B,C,D,a,alfa,b,beta,x)**

y para trabajar con matrices a

- **[X,Z] = spedoM(A_,B_,C_,D_,a,alfa,b,beta,x)**
- **[X,Z] = spedoNM(A_,B_,C_,D_,a,alfa,b,beta,x)**

9.6 Funciones auxiliares para calcular integrales a partir de puntos

- **[I,n]=int_simpson_pt(z,w)**

```

%
% Calcula la integral de una función que pasa por los puntos (z,w)
% utilizando el método de Simpson.
% I es el valor de la integral.
% n es el número de iteraciones.
%
function [I,n]=int_simpson_pt(z,w)
    m=length(z);
    n=floor(m/2);
    if (m/2)==n
        I=(z(2)-z(1))*(w(1)+w(2))/2;
        z(1)=[];
        w(1)=[];
    else
        I=0;
    end

    for j=2:2:m-1
        p=z(j)-z(j-1);
        q=z(j+1)-z(j);
        I=I+(w(j-1)*(2-q/p)+w(j)*(p+q)^2/(p*q)+w(j+1)*(2-p/q))*(p+q)/6;
    end
end

```

- **I=int_simpson2(x,y,f)**

```

%
% Calcula la integral doble por el método de Simpson
% de una función a partir de los puntos (x_i,y_j)
% f función

```

```
% x vector de abscisas x_i
% y vector de ordenadas y_j
% I resultado aproximado de la integral doble
%
function I=int_simpson2(x,y,f)
    n = numel(x);
    m = numel(y);
    I = 0;
    for i=2:2:n-1
        r = x(i)-x(i-1);
        s = x(i+1)-x(i);
        for j=2:2:m-1
            p=y(j)-y(j-1);
            q=y(j+1)-y(j);
            I1 = f(i-1,j-1) * (2-q/p) * (p+q) / 6 * (2-s/r) * (r+s) / 6;
            I2 = f(i-1,j) * (p+q)^2 / (p*q) * (p+q) / 6 * (2-s/r) * (r+s) / 6;
            I3 = f(i-1,j+1) * (2-p/q) * (p+q) / 6 * (2-s/r) * (r+s) / 6;
            I4 = f(i,j-1) * (2-q/p) * (p+q) / 6 * (r+s)^2 / (r*s) * (r+s) / 6;
            I5 = f(i,j) * (p+q)^2 / (p*q) * (p+q) / 6 * (r+s)^2 / (r*s) * (r+s) / 6;
            I6 = f(i,j+1) * (2-p/q) * (p+q) / 6 * (r+s)^2 / (r*s) * (r+s) / 6;
            I7 = f(i+1,j-1) * (2-q/p) * (p+q) / 6 * (2-r/s) * (r+s) / 6;
            I8 = f(i+1,j) * (p+q)^2 / (p*q) * (p+q) / 6 * (2-r/s) * (r+s) / 6;
            I9 = f(i+1,j+1) * (2-p/q) * (p+q) / 6 * (2-r/s) * (r+s) / 6;
            I=I+I1+I2+I3+I4+I5+I6+I7+I8+I9;
        end
    end
end
```